
GENCI
RAPPORT D'ACTIVITÉS
2011

Pas à pas, la maladie d'Alzheimer dévoile ses secrets... Grâce aux moyens mis à disposition de la communauté scientifique française par GENCI, une nouvelle étape a été franchie dans la possibilité de simuler les mécanismes chimiques les plus intimes de cette affection qui touche plus de 20 millions de personnes dans le monde.

Simulation des trajectoires des électrons autour des noyaux atomiques de la ß-amyloïde
Projet CNRS/Université Paul-Sabatier/Université de Toulouse, soutenu par l'ANR.

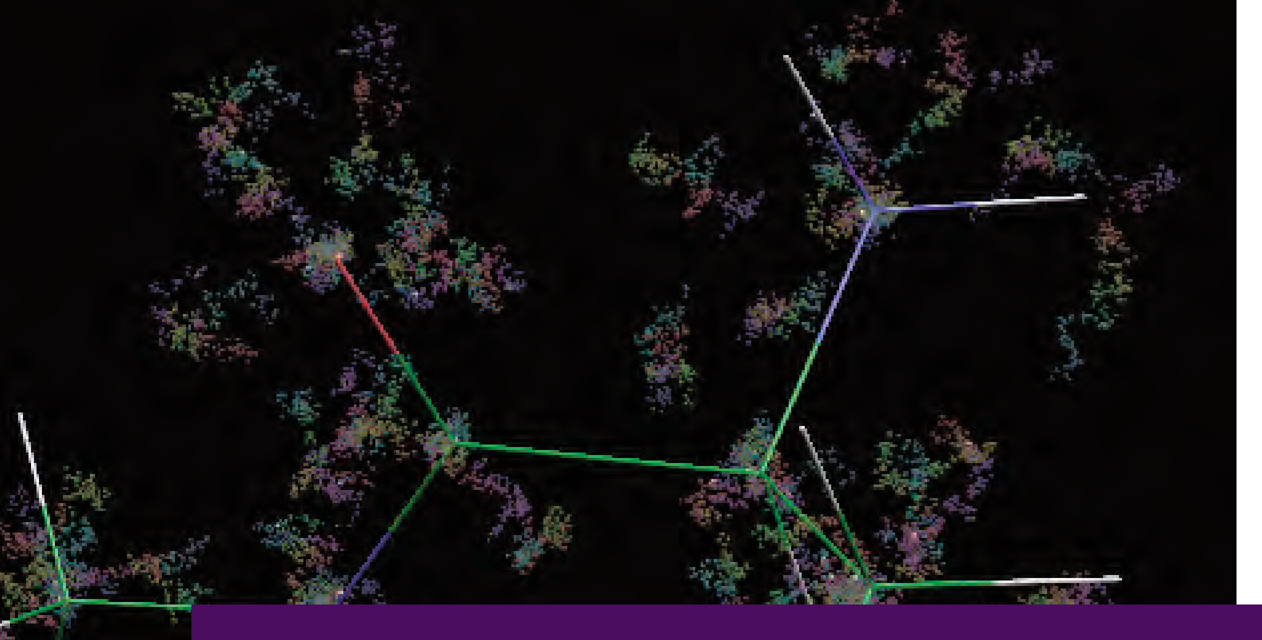
RAPPORT D'ACTIVITÉS 2011

Directeur de la publication : Catherine RIVIERE

CoordInation, conception et réalisation : Laetitia BAUDIN (avec la participation de Nicolas MIGNEREY sur la partie scientifique)

Contribution des MOE : Christine MÉNACHÉ (CEA/CCRT), Francis DAUMAS (CINES), Denis GIROU (CNRS/IDRIS)

Impression : JVImpression - Photo de couverture : © Obea Communication



La maladie d'Alzheimer est déclenchée par le fonctionnement anormal d'une protéine particulière, appelée ß-amyloïde. Selon une des hypothèses avancée par les chercheurs, certains ions métalliques pourraient favoriser l'accumulation progressive de cette protéine sous forme de plaques amyloides à l'origine du dysfonctionnement et de la dégénérescence des neurones. Mieux comprendre l'action des ions métalliques sur la ß-amyloïde constitue donc un véritable enjeu scientifique.

En décembre 2011, une équipe de recherche CNRS/Université de Toulouse a réussi à modéliser cette protéine avec une très grande précision. Leurs calculs ont été réalisés pour la première fois sur la quasi-totalité des cœurs de calcul du supercalculateur CURIE (voir page 34) avec le logiciel QMC=Chem et se sont révélés plus fiables que ceux obtenus jusque-là par l'utilisation de méthodes classiques. Plus tôt dans l'année, ce code avait bénéficié d'une optimisation par les équipes d'ECR Lab (voir page 23) pour être adapté aux processeurs de dernière génération installés sur CURIE.

Ces premiers résultats très prometteurs démontrent qu'avec CURIE, la précision nécessaire aux explorations à l'échelle des processus chimiques élémentaires à l'œuvre dans les systèmes moléculaires complexes de la vie est désormais accessible. Explorer cette dimension, c'est pouvoir comprendre les mécanismes en jeu, en déterminer les facteurs importants et suggérer de nouvelles pistes thérapeutiques.

GENCI

Grand équipement national de calcul intensif

Créé en 2007 par les pouvoirs publics pour placer la France au meilleur niveau européen et international dans le domaine du calcul intensif, GENCI associe les principaux acteurs de la recherche académique dans ce domaine (voir page 36).
***GENCI** a pour **missions** de :*
▶ ***financer et coordonner** la mise en œuvre de la stratégie française d'équipement des trois centres nationaux de calcul intensif pour la recherche civile ;*
▶ ***participer** pleinement à l'organisation et la réalisation d'un espace européen du calcul intensif pour la recherche. A ce titre, GENCI représente la France au sein de PRACE ;*
▶ ***promouvoir** la simulation et le calcul intensif auprès des industriels, grands groupes comme PME, et dans la sphère de la recherche fondamentale et technologique.*

***GENCI est une société civile** détenue à 49 % par l'Etat, représenté par le Ministère de la recherche et l'enseignement supérieur, 20 % par le CEA, 20 % par le CNRS, 10 % par les Universités qui sont représentées par la conférence des présidents d'université et 1 % par Inria.*

Le calcul intensif, un investissement capital pour l'avenir

par Catherine Rivière, PDG de GENCI

L'année 2011 a été particulièrement décisive pour GENCI. Trois résultats notamment l'illustrent et concrétisent les efforts que nous avons déployés, depuis 2007, pour asseoir la politique nationale en matière de calcul intensif.



En janvier 2011, le projet Equip@meso, porté par GENCI avec dix partenaires académiques et universitaires en région, a été retenu au terme du premier appel à projets « Equipements d'excellence », dans le cadre des Investissements d'avenir décidés par les pouvoirs publics.
Avec ce projet, GENCI dispose désormais des moyens de développer, au niveau régional, et en lien avec les centres universitaires de calcul, la dynamique initiée en 2007 au niveau national. Les premiers résultats sont très encourageants (voir pages 32 et 33).

Début juillet 2011, une première PME française, le motoriste nivernais Danielson Engineering, obtenait d'Oseo le financement de sa nouvelle plate-forme de calcul dans le cadre de l'initiative HPC-PME mise en œuvre par GENCI, Inria et Oseo. L'expertise technique dont a bénéficié Danielson Engineering avec HPC-PME a permis à cette entreprise non seulement de s'équiper des moyens de simulation numérique les mieux adaptés à ses besoins, donc d'accroître sa compétitivité, mais également de créer des emplois. Trois recrutements ont été réalisés et un quatrième est en cours (voir pages 30 et 31).

Plus globalement, une quinzaine de PME bénéficient actuellement de cet accompagnement personnalisé qui vise à faire, avec elles, la démonstration du gain de compétitivité et d'innovation qu'elles pourraient obtenir en passant au calcul intensif.

Enfin, le mois de décembre 2011 a vu la réception définitive du supercalculateur CURIE. Conçu par Bull pour GENCI, exploité par les équipes opérationnelles du Très Grand Centre de calcul du CEA (TGCC) à Bruyères-le-Châtel, CURIE constitue le fer de lance de la politique portée par GENCI et vient renforcer l'offre en ressources pétaflopiques disponibles en Europe. Avec son architecture unique, combinant une très grande puissance de calcul et une capacité élevée de traitement des données générées, il permet d'envisager des avancées scientifiques inédites (voir page 34).

Placer la France au niveau européen

Ces trois résultats, fondamentaux pour GENCI, témoignent de la vitalité du calcul intensif au plan national et placent la France en très bonne position dans la dynamique engagée en Europe par PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe). Structure indépendante, financée par vingt-quatre Etats partenaires dont la France qui y est représentée par GENCI. Cette infrastructure européenne de calcul intensif PRACE a pour mission de coordonner la mise en œuvre d'un réseau européen de centres de calcul de très haut niveau (voir page 24).

Avec CURIE, dont les ressources ont été intégrées aux appels à projets de PRACE dès 2011, la France a non seulement tenu son engagement d'accueillir un des supercalculateurs de l'infrastructure européenne de calcul intensif mais a aussi permis à PRACE de poursuivre son déploiement, conformément à la feuille de route décidée dès 2008.

L'Europe du calcul intensif est donc plus que jamais


Le supercalculateur CURIE de GENCI, concrétisation de l'engagement de la France dans PRACE

sur les rails. Avec les scientifiques et les industriels, avec les instances nationales et internationales, se met rapidement en place en Europe tout un écosystème autour du calcul scientifique, qui permettra à nos laboratoires et à nos entreprises d'accroître leur compétitivité. CURIE, avec PRACE, est, à ce titre, un investissement capital pour l'avenir.

Poursuivre la dynamique

Au-delà de ces résultats, d'autres événements ont jalonné la vie de GENCI en 2011. D'abord, le lancement de la procédure d'appel d'offres pour renouveler les moyens de l'IDRIS, le centre de calcul intensif du CNRS : avec ce nouvel investissement, qui devrait se concrétiser dans le courant du premier semestre 2012, GENCI aura achevé de renforcer les moyens de calcul nationaux, après ceux du CINES avec le supercalculateur JADE et ceux du CEA avec TITANE et CURIE. Un cycle s'achèvera donc mais le lien avec les communautés scientifiques devra être, plus que jamais, développé pour les aider à prendre la pleine mesure des outils mis à leur disposition.

C'est dans cette perspective que GENCI a organisé, en mai 2011 à Paris, une journée de séminaire, baptisée « Petaflop/s mode d'emploi ». Réunissant une centaine de participants, grands utilisateurs scientifiques du calcul intensif et jeunes chercheurs, ce séminaire leur a donné l'occasion d'échanger sur leurs problématiques respectives et les avancées qu'ils attendent notamment du passage au petaflop/s (voir page 21). Devant le succès de cette journée, GENCI a décidé de la pérenniser. Rendez-vous est pris en novembre 2012 pour parler une nouvelle fois des usages du calcul intensif.

Démontrer les bénéfices du calcul intensif

Car un supercalculateur, aussi puissant soit-il, n'est qu'un outil au service de la production de connaissances. A cet égard, les dix résultats présentés dans la partie « Bilan scientifique » de ce rapport d'activités (voir page 44) montrent tous les bénéfices que la science, et plus largement la société, peuvent tirer de la simulation numérique par le calcul intensif.
Cette démonstration est une des conditions de leur développement, dans l'industrie comme dans le monde de la recherche. Ainsi, en décembre 2011, GENCI a été auditionné par le Sénat, en compagnie de représentants du CEA et de Météo France. Objectif : présenter les apports de la simulation numérique à la gestion des risques et à la prise de décision.

Tous ces résultats confirment que GENCI contribue à l'organisation du paysage national du calcul intensif tout en démultipliant désormais son action tant au niveau européen qu'à l'échelle régionale. Avec pour seul leitmotiv d'aider la communauté scientifique à utiliser les calculateurs dont chaque chercheur a besoin et en s'appuyant sur un réseau de partenaires.
Grâce à la dynamique instaurée par le Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche, le CEA, le CNRS, la Conférence des Présidents d'Universités et Inria avec la création de GENCI en 2007, la puissance de calcul disponible pour tous les scientifiques français a été multipliée par 50, en cinq ans.

Faire de la simulation numérique et de son bras armé, le calcul intensif, un outil d'amélioration de notre compétitivité, tant scientifique qu'industrielle, est aujourd'hui une réalité. La démocratisation de l'utilisation du calcul intensif est en route !


2
2
0
0





Convaincre

Le calcul intensif ?

Un outil pour comprendre le monde

Dès les premiers âges de l'humanité, l'homme a eu besoin de compter... Son bétail, ses biens, le prix d'une transaction. Dans les sociétés primitives, on utilise d'abord et naturellement ses dix doigts ; l'histoire veut que cette pratique soit à l'origine du système décimal. Puis, de façon plus perfectionnée, dans l'Antiquité, on se sert de cailloux qu'on entasse ou de bâtons qu'on entaille.

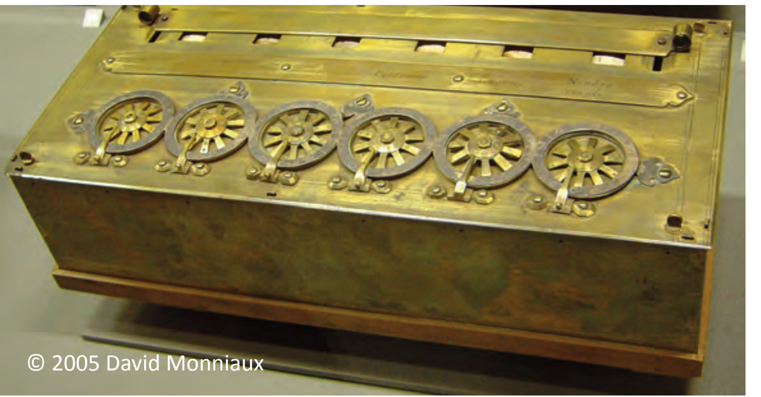
Les os d'Ishango, également appelés bâtons d'Ishango, sont considérés comme le plus ancien outil de calcul jamais mis à jour. Il s'agit de vestiges archéologiques découverts dans l'ancien Congo belge (aujourd'hui République démocratique du Congo), datés d'environ de 20 000 ans et portant plusieurs colonne d'entailles.
En Abyssinie (l'Éthiopie aujourd'hui), il était d'usage pour les guerriers partant au combat de déposer un caillou sur un tas, caillou qu'il retirait en revenant du combat. Le nombre de cailloux non repris permettait de déterminer le nombre de morts au combat. De même, les bergers comptabilisaient-ils leurs moutons avec des cailloux déposés dans un pot, à l'entrée et à la sortie de la bergerie.

A l'origine du calcul ? Un caillou romain !

C'est parce que nos ancêtres comptaient avec des (petits) cailloux (calculus en latin) que nous parlons aujourd'hui de calcul.
Calcul a conservé son acception originale en médecine où il désigne toujours un « caillou », c'est-à-dire une masse minérale qui peut notamment se former dans les voies urinaires (calculs rénaux) ou biliaires (calculs biliaires).

Le caillou et le bâton sont l'un des plus anciens systèmes de calcul découvert à ce jour et permettaient d'effectuer des additions et des soustractions sur des nombres entiers : nombre d'animaux dans un troupeau, nombre de soldats dans une armée, nombre de jours dans un calendrier, prix à payer lors d'une transaction ou impôt.
Ces objets pouvaient également être façonnés en argile sous la forme de demi-sphères ou de sphères, par exemple. Lors de fouilles organisées en 1977 à Suse, les archéologues ont ainsi mis au jour des bourses en terre cuite scellées, contenant des billes en terre crue datant de 3300 av. J.-C et qui servaient d'archives aux comptables sumériens lors de transactions.
Cailloux naturels ou façonnés et bâtons sont à l'origine des tablettes (ou abaques) et des bouliers qui seront utilisés pendant plusieurs siècles et seront sans cesse perfectionnés pour effectuer des calculs de plus en plus complexes : longueurs, durées, proportions...

Avec la machine à calculer que Pascal présente en 1645, certaines opérations sont automatisées : additionner et soustraire deux nombres de façon directe, faire des multiplications et des divisions par répétitions.



L'objectif du mathématicien-philosophe ? Aider son père, nommé surintendant des finances de Haute-Normandie, à (bien) calculer les recettes fiscales de la province. La Pascaline ouvre la voie au développement du calcul mécanique d'abord en Europe, puis dans le monde entier. Les siècles suivants verront la mise au point de calcula-

trices mécaniques, électromécaniques puis électroniques avec l'invention du microprocesseur par Intel en 1971. Calculatrices et caisses enregistreuses existent toujours aujourd'hui dans des versions parfois très perfectionnées.

En sciences et dans l'industrie, le développement de la **simulation numérique**, qui permet de reproduire virtuellement des phénomènes complexes, a conduit à concevoir un autre type de « machine à calculer » : le **supercalculateur**. Le premier d'entre eux, conçu en Allemagne dès la fin des années trente, était capable d'effectuer une opération par seconde... Aujourd'hui, les machines les plus performantes peuvent en réaliser des millions de milliards dans le même laps de temps !

Colossus en Grande-Bretagne, un des premiers supercalculateurs (1943)
© Public Record Office, London

D'où le terme de **calcul intensif** qui désigne, également, par extension, la science développée autour de ces équipements (matériels, logiciels etc.).

Simuler c'est calculer

La simulation numérique consiste à exécuter un programme informatique sur un ordinateur pour étudier le fonctionnement et les propriétés d'un système ou d'un phénomène ainsi qu'à en prédire l'évolution, par exemple la résistance d'une plateforme pétrolière à la houle ou la fatigue d'un matériau soumis à des vibrations.
La simulation numérique est devenue un outil essentiel dans les domaines scientifique et industriel. Elle permet de remplacer les expériences qui ne peuvent pas être menées en laboratoire, surtout quand elles sont dangereuses (simulation d'un incident industriel), coûteuses (design d'avion), de longue durée (climatologie) ou encore inaccessibles à l'échelle humaine (astrophysique).

Le supercalculateur : un tigre de silicium

Un supercalculateur, c'est un très gros ordinateur constitué de quelques milliers de serveurs reliés entre eux par des réseaux à très haut débit et composés de dizaines d'unités de calcul. Actuellement, un supercalculateur travaille aussi vite qu'un ensemble de 150000 ordinateurs portables.

© HP

Le calcul intensif est aujourd'hui indispensable dans de **très nombreux domaines académiques et industriels** : l'environnement et le climat pour la prévision météorologique ou l'évaluation des risques naturels comme les cyclones ou les tsunamis ; l'automobile ; l'aéronautique et le spatial pour réduire les temps de conception et de validation de certains composants ; la chimie, la médecine et la biologie pour mettre au point des médicaments très ciblés ; la physique des matériaux pour qualifier de nouveaux concepts ou mesurer leur résistance ; l'énergie pour optimiser la prospection pétrolière ou designer les centrales de demain ; la finance pour évaluer certains produits complexes ; le multimédia pour mettre au point les séquences en 3D (relief)...

Les **performances** d'un supercalculateur sont définies à la fois par sa capacité à exécuter rapidement un calcul et à traiter de très grands volumes de données.
L'unité de mesure est le **flop/s** (FLoating point Operation Per Second ou opération flottante à la seconde). Deux fois par an, en juin et en novembre, le **Top500** établit le classement des supercalculateurs les plus performants installés dans le monde ; ce classement est réalisé par des chercheurs des universités de Mannheim (Allemagne), Berkeley et Knoxville (Etats-Unis).
En novembre 2011, les quinze supercalculateurs les plus performants au monde, dont CURIE (voir page 34), délivraient quelques petaflop/s quand les autres produisent plusieurs centaines de teraflop/s. La prochaine génération atteindra l'exaflop/s dans moins d'une dizaine d'années.

EXAFLOP/S (2018 ?)
1 milliard de milliards d'opérations à la seconde

PETAFLOP/S (2008)
1 million de milliards d'opérations à la seconde

TERAFLOP/S (1997)
1000 milliards d'opérations à la seconde

GIGAFLOP/S (1985)
1 milliard d'opérations à la seconde

MEGAFLOP/S (1964)
1 million d'opérations à la seconde



Le calcul intensif ?
Un écosystème à l'échelle européenne

En France, il existe différents types de moyens de calcul à la disposition des scientifiques. Au niveau régional, ce sont des **moyens dits de Tier2**, d'une puissance inférieure à 50 teraflop/s et généralement exploités dans les centres universitaires. Avec le projet Equip@meso, porté par GENCI (voir page 32), une dizaine d'entre eux, répartis sur tout le territoire national, vont être significativement renforcés pour offrir un meilleur service.

Au niveau national, il s'agit des **moyens dits de Tier1**, d'une puissance de plusieurs centaines de teraflop/s, qui sont ceux des trois centres nationaux (voir page 14) dont l'action est coordonnée par GENCI

Enfin, au niveau européen, des **moyens dits de Tier0**, de capacité pétaflopique, sont accessibles par le biais de l'infrastructure PRACE (voir page 24) dont la France, représentée par GENCI, est un des membres fondateurs.

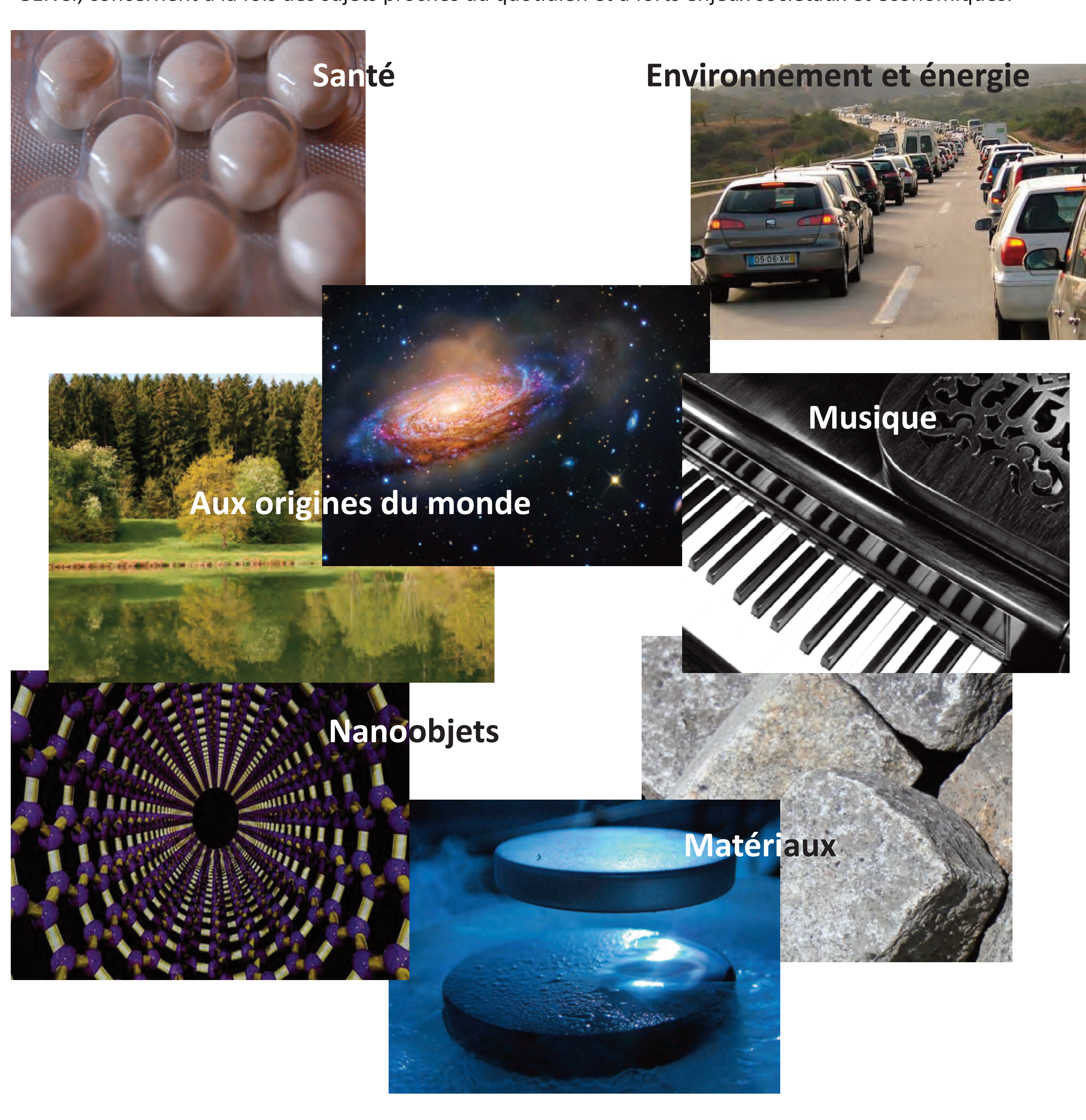
Tier0
Centres européens
Tier1
Centres nationaux
Tier2
Centres régionaux/universitaires

FZJ / Jülich
JUGENE
HLRS / Stuttgart
HERMIT
LRZ / Munich
SuperMUC
CRIHAN
Haute-Normandie
Université de Reims
Champagne-Ardenne
Paris
Orsay
DRIS
Bruyeres-le-Chatel
CCRT / TGCC
CURIE
Université de
Strasbourg
Maison de la
Simulation
Infrastructure européenne
Centres de calcul nationaux
Partenaires Equip@meso
Université Claude Bernard
Lyon
Université Joseph Fourier
Grenoble
Montpellier
CINES
PRES Université
de Toulouse
Université
Aix-Marseille
BSC / Barcelone
MareNostrum
CINECA / Bologne
FERMI

Pourquoi parle-t-on de Tier ?
Ce tier-là vient de l'anglais et signifie niveau... D'où le fait qu'on représente généralement l'écosystème du calcul intensif sous la forme d'une pyramide à niveaux

Depuis 2007, les investissements réalisés par GENCI ont permis des avancées majeures dans tous les domaines de la science et de l'industrie. Avec un peu plus d'un petaflop/s disponible début 2012, les scientifiques français disposent des moyens de faire la course dans le peloton de tête.

En 2011, plusieurs résultats scientifiques inédits ont été obtenus par des équipes françaises de recherche sur les moyens mis à disposition par GENCI. Ces résultats, présentés en page 44 du rapport d'activités de GENCI, concernent à la fois des sujets proches du quotidien et à forts enjeux sociétaux et économiques.



Retrouvez le bilan scientifique en page 38



Promotion

Valoriser l'usage du calcul intensif

Pour faire connaître et mettre en valeur les gains obtenus par l'usage du calcul intensif et de la simulation numérique, GENCI soutient et participe à différentes initiatives.

Prix Bull-Fourier : tremplin pour jeunes chercheurs
Pour sa 3e édition, en 2011, le prix Bull-Fourier est revenu à Julien Bohbot, chef de projet et ingénieur de recherche à la Direction des techniques d'applications énergétiques d'IFP Énergies Nouvelles.
Ses travaux ont permis de paralléliser l'application IFP-C3D [c'est-à-dire la diviser en plusieurs tâches indépendantes s'exécutant simultanément pour gagner en rapidité de calcul] utilisée pour simuler la combustion des moteurs automobiles. Les avancées obtenues ouvrent des perspectives importantes de progrès dans l'amélioration des codes visant à réduire les émissions de polluants.



De gauche à droite : en présence de Cédric Villani, mathématicien et lauréat de la médaille Fields 2010, qui parrainait l'édition 2011, et de Catherine Le Louarn, responsable des opérations de GENCI, Julien Bohbot reçoit le prix Bull-Fourier des mains de Matthew Foxton, vice-président stratégie et marketing de Bull. © Bull

Créé en 2009 avec le soutien de GENCI, le prix Bull-Fourier vise à promouvoir le développement de la simulation numérique en France tant dans le domaine scientifique que dans ses applications industrielles. Il récompense une personne pour des travaux réalisés dans le cadre d'un laboratoire français, public ou privé. Ce prix rend hommage à Joseph Fourier dont les travaux ont largement contribué à la modélisation mathématique des phénomènes physiques.

Forum Ter@tec : au rendez-vous du calcul intensif
GENCI est partenaire de ce rendez-vous annuel, qui a rassemblé, en 2011, près d'un millier d'experts du calcul intensif et de la simulation numérique. GENCI avait choisi d'y présenter l'Initiative HPC-PME (voir page 30) et le projet Equip@meso (voir page 32).

La Recherche : populariser le calcul intensif
GENCI a activement participé à la nouvelle édition du supplément HPC réalisé tous les deux ans par le magazine La Recherche et qui présente le panorama du calcul intensif en France et dans le monde.
Pour la première fois en 2011, GENCI était également partenaire du prix La Recherche. L'objectif : contribuer à populariser des travaux de recherche, fondamentaux ou appliqués, qui utilisent la simulation numérique et le calcul intensif, et à mettre en valeur les équipes, interdisciplinaires et souvent internationales, qui les ont menés.



Catherine Rivière, PDG de GENCI, remet le prix La Recherche - catégorie Mathématiques à Thierry Colin, de l'Université de Bordeaux, pour la modélisation numérique de la croissance des métastases. © La Recherche

Créé il y a huit ans par le magazine La Recherche, ce prix a pour objectif de valoriser des travaux de recherche remarquables dans différentes disciplines scientifiques

Bonnes vibrations





Visibilité et reconnaissance, ticket gagnant du prix Bull Fourier

Dimitri Komatitsch directeur de recherche au CNRS (Laboratoire de mécanique et d'acoustique, CNRS/Université d'Aix-Marseille), spécialiste de géophysique, a été deux fois lauréat du prix Bull Fourier, en 2009 et 2010.

Quelles ont été vos motivations pour vous porter candidat ?

J'avais entendu parler de ce prix dans la communauté HPC, sur Internet et à l'occasion de différentes conférences. J'ai vu que le prix était très sélectif et bénéficiait d'un fort soutien de GENCI et de Bull, qui sont deux acteurs majeurs du secteur. J'ai donc candidaté, en pensant que c'était une bonne façon de mettre en valeur mes travaux (même si je ne gagnais pas).


DR

En 2009, lorsque j'ai reçu le troisième prix (300 000 heures CPU, mises à disposition par GENCI), je me suis rendu compte que, contrairement à moi, le lauréat du premier prix utilisait des cartes graphiques GPU. J'ai compris qu'il fallait que j'intègre cet aspect dans mes codes au cours de l'année 2009 pour avoir davantage de visibilité, et c'est ce que j'ai fait.

Que vous ont apporté ces prix ?

J'en ai retiré énormément de bénéfices ! De la visibilité pour mes travaux, la possibilité de les diffuser et les faire connaître dans une communauté plus large que la mienne (c'est-à-dire en dehors de la géophysique), la possibilité de tourner sur les plus grosses machines et d'y gagner des heures...

J'ai également noué de nombreux contacts dans la communauté HPC et GPU, en particulier de très bons contacts directs avec GENCI et avec l'Académie des Sciences par l'entremise d'Olivier Pironneau, président du Comité stratégique du calcul intensif, qui avait pris connaissance de mes travaux à l'occasion de la remise du prix 2009 lors du forum Ter@tec.

Vos objectifs ont-ils été atteints ?

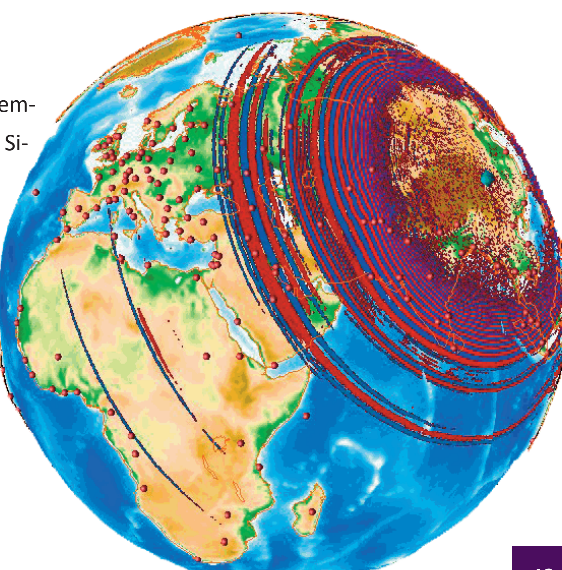
Oui, et même au-delà de mes espérances ! D'une part, j'ai reçu beaucoup de retours positifs et d'encouragements ; d'autre part, j'ai pu accéder aux plus gros calculateurs et participer à de grands défis de calcul, les Grands Challenges. Enfin, j'ai établi un certain nombre de contacts avec la presse, ce qui permet de faire connaître ses travaux et son laboratoire de recherche

Quels enseignements en tirez-vous ?

Je pense qu'il est utile d'investir du temps à travailler avec des groupes comme GENCI et Bull car c'est une démarche potentiellement gagnante/gagnante en termes de visibilité, d'accès aux machines... Autre motivation : la rencontre d'autres chercheurs et ingénieurs, avec lesquels on partage les mêmes buts ou, au minimum, le même enthousiasme pour le calcul intensif. Une communauté est en train de se créer en France et Europe dans ce domaine ; c'était moins vrai il y a cinq ans ou dix ans. Les défis actuels sont trop gros pour les relever tout seul dans son coin, donc se fédérer, comme c'est aujourd'hui le cas, est très positif.

En conclusion, trois mots pour définir l'intérêt de ce prix

Je dirais : forte visibilité et reconnaissance, accès en dehors de sa propre communauté scientifique, accès à un fort soutien national de GENCI et Bull pour ses travaux présents et futurs.



Modélisation du tremblement de terre à Sichuan en Chine, le 12 mai 2008 : progression de la propagation des ondes sismiques sur l'ensemble du globe terrestre. © DK



Maîtrise d'ouvrage nationale

Des ressources au maximum

Avec une charge annuelle moyenne sur l'ensemble des calculateurs de plus de 80 %, les ressources de GENCI ont été utilisées à leur maximum en 2011, démontrant ainsi la vitalité de la demande scientifique.

En charge de fixer les orientations stratégiques et de réaliser les investissements prioritaires dans le domaine du calcul intensif pour la recherche, GENCI assure la fonction de maîtrise d'ouvrage nationale pour les moyens nationaux de calcul, répartis dans trois centres (TGCC/CCRT du CEA, CINES pour l'enseignement supérieur et IDRIS du CNRS) qui ont un rôle de maîtrise d'œuvre des équipements (voir pages 18, 19 et 20).

L'accès aux moyens de calcul nationaux repose sur un mécanisme d'appels à projet. Les organismes éligibles, principalement issus de la recherche publique, formulent des demandes d'heures de calcul en les motivant par les résultats scientifiques attendus. Ces demandes sont évaluées par les comités thématiques de GENCI, qui classent les projets déposés.

454 millions d'heures en 2011

Lors des deux sessions de la campagne 2011, organisées en janvier et en juillet, 454 millions d'heures de calcul ont été attribuées à 615 projets. Le nombre d'heures mises à disposition de la communauté scientifique française a augmenté significativement en 2011 (+ 12%). La part des heures attribuables pour la campagne 2011 a pu être augmentée de 75 % à 80 % des heures disponibles du fait de la bonne disponibilité des moyens de calcul nationaux et de leur capacité à supporter une charge importante.

Elle a également bénéficié de l'ouverture de la tranche dite « nœuds larges » de CURIE (voir page 34), en juin à quelques projets pilotes.

Sur les 615 projets retenus, 143 étaient de nouveaux projets (23 % contre 30 % en 2010).

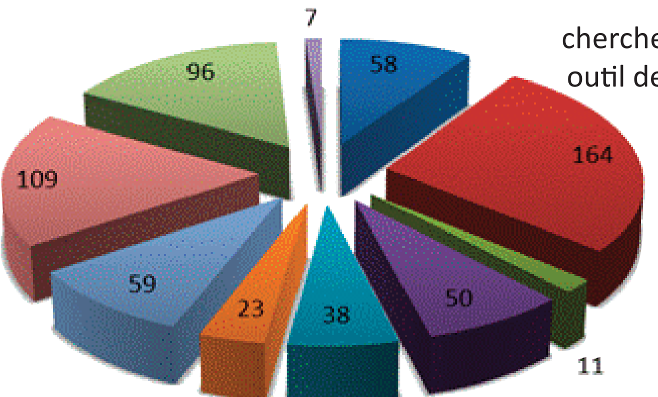
Outre la vitalité de la communauté scientifique française, ce taux de renouvellement démontre que les moyens de calcul sont désormais utilisés dans la durée par les équipes de recherche et sont ainsi devenus un outil de travail à part entière.

Globalement, le nombre de projets déposés (621) est resté stable par rapport à l'année précédente mais le nombre d'heures moyen demandé par projet a fortement augmenté en 2011. Les demandes d'heures sur les principaux calculateurs ont été près de deux fois supérieures au nombre d'heures offert.

Par rapport à 2010, la répartition des dossiers par comité thématique est également restée stable en 2011. Les moyens de calcul nationaux profitent à toutes les communautés scientifiques et leur utilisation concerne toutes les disciplines, comme le montre le graphique ci-contre.

Avec la très forte augmentation du nombre moyen d'heures demandées, l'écart avec les heures fina-

Répartition des dossiers par comité thématique



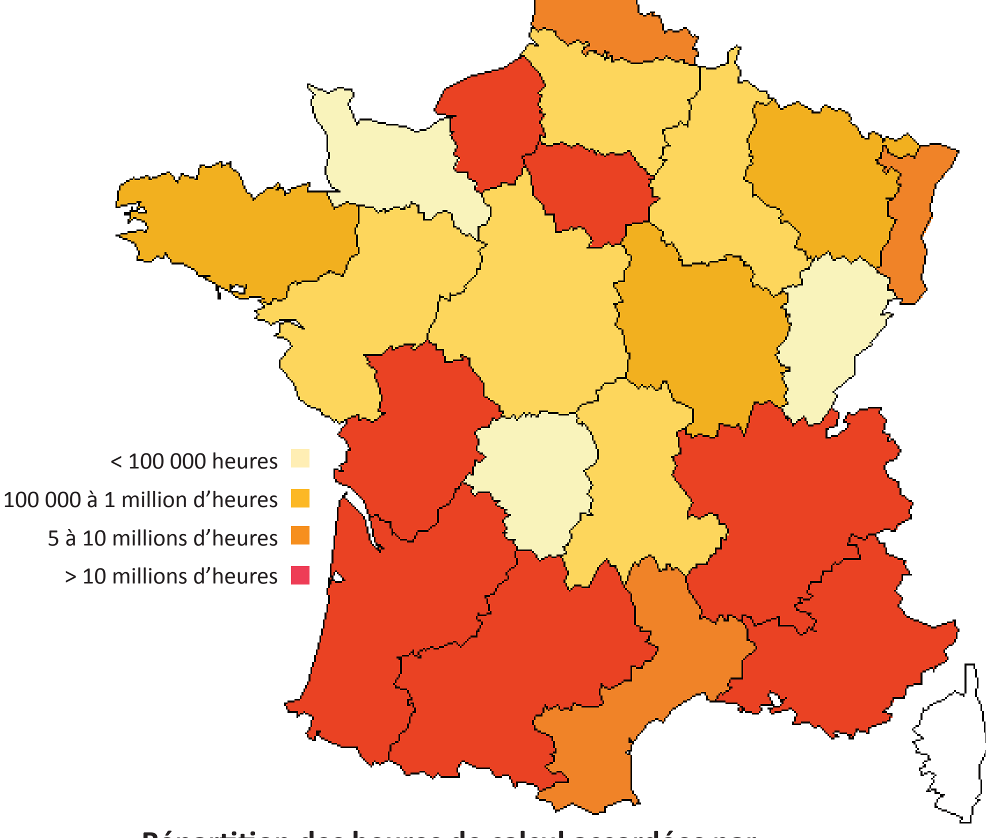
1 - ENVIRONNEMENT / 2 - MECANIQUE DES FLUIDES, FLUIDES REACTIFS, FLUIDES COMPLEXES 3 - SIMULATION BIOMEDICALE ET APPLICATION A LA SANTE / 4 - ASTROPHYSIQUE ET GEOPHYSIQUE / 5 - PHYSIQUE THEORIQUE ET PHYSIQUE DES PLASMAS / 6 - INFORMATIQUE, ALGORITHMIQUE ET MATHEMATIQUES / 7 - SYSTEMES MOLECULAIRES ORGANISES ET BIOLOGIE / 8 - CHIMIE QUANTIQUE ET MODELISATION MOLECULAIRE / 9 - PHYSIQUE, CHIMIE ET PROPRIETES DES MATERIAUX / 10 - NOUVELLES APPLICATIONS ET APPLICATIONS TRANSVERSALES DU CALCUL

lement allouées s'est donc creusé. La demande a été très nettement supérieure à l'offre.

Cette pression (1.7 en moyenne) a conduit GENCI à allouer la presque totalité des ressources disponibles (la totalité sur Vargas et Titane) dès la première session.

A plein régime

Tout au long de l'année 2011, avec une charge moyenne sur l'ensemble des calculateurs de près de 80 %, les ressources de GENCI ont été utilisées à leur maximum. En 2012, avec la disponibilité totale de CURIE et le renouvellement prévu des calculateurs de l'IDRIS, GENCI aura achevé de renforcer les moyens nationaux.

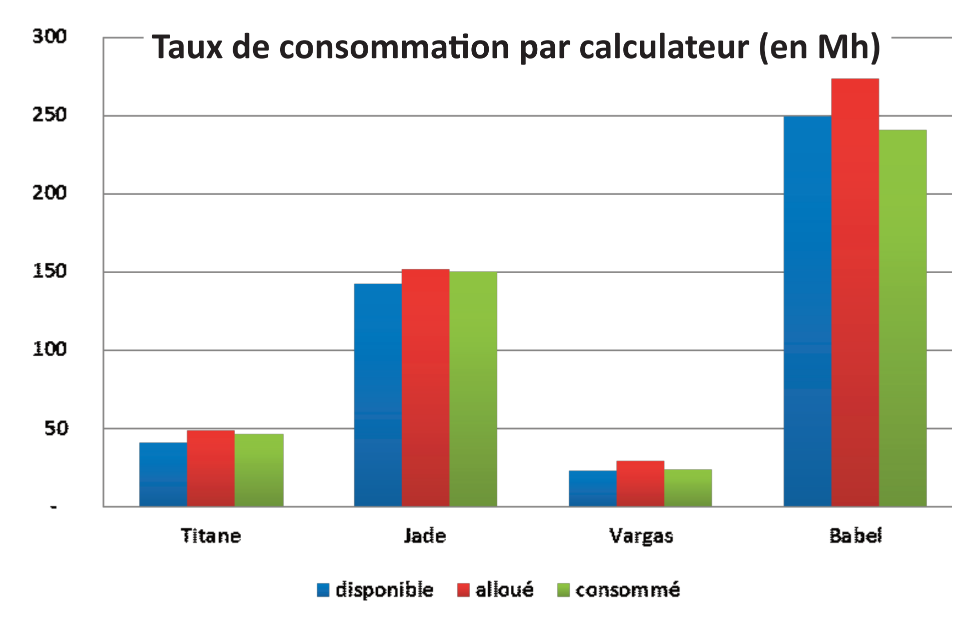


Répartition des heures de calcul accordées par région d'appartenance des porteurs de projets en 2011

© MGM (GS)

Les ressources des trois centres nationaux sont utilisées par des projets issus de toutes les régions françaises et concernent toutes les thématiques de recherche. Ces projets sont, en majorité, portés par des équipes mixtes.

Tous centres confondus, les porteurs de projets bénéficiant d'une allocation d'heures de calcul viennent principalement de sept régions françaises : Ile-de-France (36 %), Rhône-Alpes (20 %), Provence-Alpes-Côte d'Azur (10 %), Midi-Pyrénées (8 %), Haute-Normandie (5 %), Aquitaine et Poitou-Charentes (3 % chacune).
Un classement sensiblement identique à celui de 2010.



Surbooking adapté

Le taux de consommation des heures allouées a parfois été supérieur aux heures en théorie disponibles sur les supercalculateurs (voir graphique ci-contre), démontrant leur très bonne disponibilité grâce à l'efficacité des équipes des centres de calcul.

Ce surbooking contrôlé a permis de tirer le meilleur parti des équipements, même s'ils se sont retrouvés à la limite de leur charge maximale (80 %).



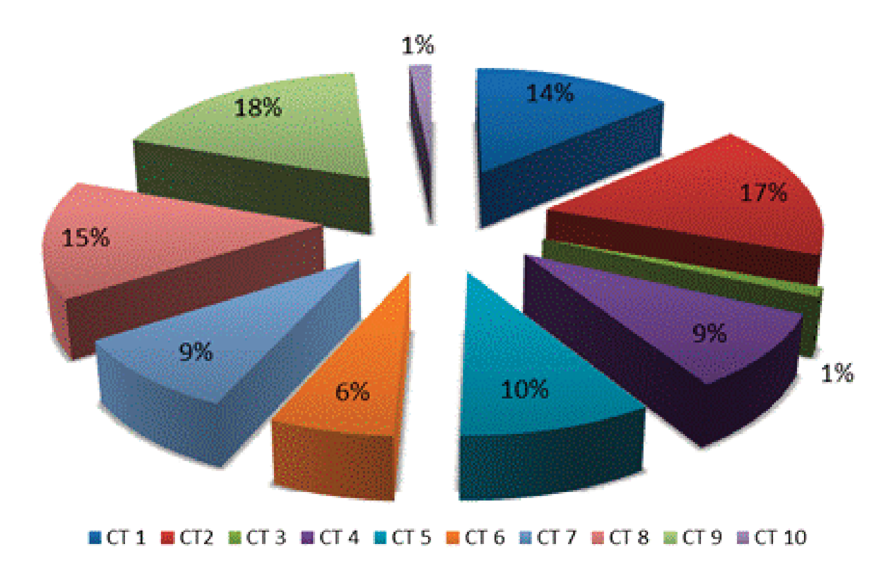
Dynamique de l'écosystème

Les ressources de GENCI s'inscrivent pleinement dans l'écosystème national du calcul intensif : en 2011, 13 % des projets bénéficiaient d'un soutien industriel et 42 % d'un soutien de l'Agence nationale de la recherche (ANR).



Les projets bénéficiant d'un soutien de l'ANR (261) ont fortement augmenté en 2011 ; ils ne représentaient que près d'un tiers des dossiers en 2010 (29 %).

Répartition des dossiers ANR par CT



Quant aux 82 projets bénéficiant d'un soutien industriel (par exemple, prise en charge d'une partie du financement du projet ou des bourses destinées aux doctorants impliqués dans le projet), ils sont très majoritairement issus de deux comités thématiques : « Mécanique des fluides, fluides réactifs, fluides complexes » (CT2, pour moitié) et « Chimie quantique et modélisation moléculaire » (CT8, 15 %).
Sont concernées de grandes entreprises comme SAFRAN, Total, EDF, AREVA, Renault, PSA, Bull, Thales, Arcelor-Mittal, Air liquide et Dassault Aviation ; mais également de plus petites structures telles que CAPS Entreprise, Fluorem ou encore Numtech.

Grands groupes comme PME innovantes, ils sont de plus en plus nombreux à être convaincus des bénéfices de la simulation numérique.

Équilibre des projets

En 2011, sur l'ensemble des allocations réalisées, le nombre de projets scientifiques (13 %) ayant bénéficié de plus d'un million d'heures de calcul a quasiment doublé, passant de 44 en 2010 à 80 en 2011 ! Ces projets ont principalement obtenu leurs heures de calcul sur JADE (CINES, 38 projets), BABEL (IDRIS, 23 projets) et TITANE (CCRT, 11 projets).

Si ces projets, gourmands en heures de calcul, sont issus de l'ensemble des comités thématiques, deux comités thématiques en demeurent les principaux pourvoyeurs : le CT2 (Mécanique des fluides, fluides réactifs, fluides complexes) et le CT5 (Physique théorique et physique des plasmas). Ces deux comités thématiques abordent des disciplines traditionnellement demandeuses d'un nombre élevé d'heures, comme la combustion pour le premier et la QCD (chromodynamique quantique ou étude des interactions entre les constituants primaires du noyau de l'atome) pour le second.

En outre, 53 projets scientifiques (9 %) ont bénéficié de moins de 5000 heures de calcul en 2011. Ce nombre a plus que doublé par rapport à l'année précédente (22 projets, moins de 4 % des projets retenus en 2010). En 2011, les moyens de GENCI ont accueilli de nouvelles applications qui auront vocation, dans un second temps, à demander davantage d'heures de calcul.
Enfin, comme les années précédentes, la très grande majorité des projets scientifiques (482, c'est-à-dire 78 % des projets retenus) ont obtenu une allocation allant de 100000 à un million d'heures.

Du Tier1 au Tier0

En 2011 comme en 2010, les ressources nationales de calcul ont été attribuées en majorité (56 %) à des projets qui utilisaient des logiciels de simulation parallélisés tournant sur moins de 256 cœurs. La proportion de travaux exécutés sur plus de 1024 cœurs de calcul a été de l'ordre de 7 %. Ces projets scientifiques sont censés, à court terme, franchir un nouveau cap et utiliser les moyens de calcul Tier0 mis à disposition par PRACE (voir page 24).
La tranche 256-1024 cœurs (25 %) représente un vivier important de logiciels aptes, à moyen terme, à migrer également sur les moyens de PRACE.
Seuls 6 % des projets utilisent des codes séquentiels et sont généralement des projets demandeurs de peu de ressources.
D'année en année, tous ces éléments favorisent une meilleure connaissance des utilisateurs des moyens de calcul nationaux ainsi que leurs besoins, de manière à les anticiper au mieux.

Justes résolutions



Des moyens nationaux indispensables au long cours

Vincent Moureau, chercheur au CORIA (COmplexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermie, unité mixte CNRS/Université de Rouen/INSA Rouen), est un utilisateur régulier des moyens de GENCI.

Vous avez bénéficié d'heures de calcul sur les moyens nationaux de GENCI. Quels résultats en attendiez-vous ?

Les heures de calcul sur les moyens nationaux nous permettent de contribuer à la modélisation de la combustion turbulente, de l'atomisation primaire à la prédiction des polluants.



Ces heures sont destinées à la réalisation de simulations haute résolution d'écoulements fortement turbulents pour améliorer notre compréhension des phénomènes physiques et proposer de nouveaux modèles prédictifs.

Par ailleurs, une part de plus en plus importante de notre travail consiste à optimiser nos outils de simulation pour tirer parti des plateformes massivement parallèles.

L'accès à ces ressources de calcul a-t-il permis de répondre à vos attentes et problématiques ?

Les ressources nationales sont aujourd'hui indispensables pour mener à bien nos travaux et elles répondent très bien à nos problématiques !

Naturellement, nous sommes toujours impatients de voir arriver de nouvelles machines encore plus puissantes pour augmenter la résolution de nos simulations et élargir le spectre des phénomènes physiques observables.

Vous avez également bénéficié de cinq millions d'heures de calcul sur les moyens européens de PRACE (CURIE). Qu'en attendiez-vous ?

Nous attendions de ce passage à l'échelle de franchir un gap en terme de résolution des phénomènes physiques intervenants dans la combustion turbulente partiellement prémélangée. Nous souhaitions comprendre les interactions entre turbulence, mélange et réactions à l'échelle du front de flamme dans un brûleur aéronautique semi-industriel.

Alors que s'achève votre allocation PRACE, quel bilan en tirez-vous ?

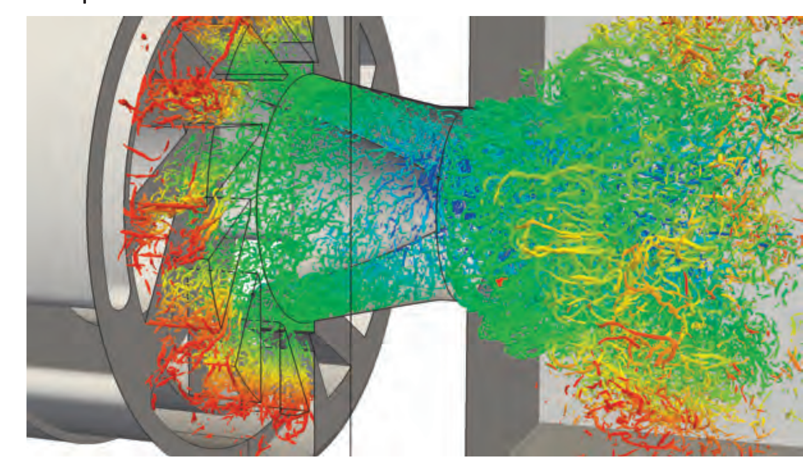
Grâce à cette allocation, nous avons apporté d'importantes améliorations aux performances de notre outil de calcul et nous avons réussi à simuler un brûleur partiellement prémélangé avec 12 milliards de cellules, un maillage environ 1000 fois plus grand que le standard dans l'industrie.

Cette résolution nous apporte des informations très intéressantes sur l'orientation des gradients d'espèces dans le front de flamme, paramètre important dans les modèles de combustion turbulente.

Quels enseignements tirez-vous de votre « expérience » sur les moyens nationaux et européens ?

Pour mener à bien une première utilisation des moyens nationaux et européens, il paraît essentiel d'adopter une démarche progressive en s'appuyant d'abord sur les compétences des mésocentres, puis celles des centres nationaux et enfin des centres européens. Lorsqu'on souhaite multiplier par dix le nombre de coeurs utilisés par une application, il faut généralement vérifier ou repenser les stratégies de communication entre cœurs, les entrées-sorties, le pré et le post-traitement des données...

Il y a donc un travail important à réaliser en collaboration avec les centres de calcul et GENCI, qui ont les compétences nécessaires.





Maîtrises d'œuvre : l'année du TGCC

Créé en 2010, le Très Grand Centre de calcul du CEA (TGCC) héberge le supercalculateur **CURIE** de GENCI dont l'installation a été achevée fin 2011. Il renforce les moyens de GENCI déjà disponibles au Centre de Calcul Recherche et Technologie (CCRT).

Durant l'année écoulée, les équipes du TGCC ont mis successivement en production les différentes configurations de CURIE (voir p. 34). Dans le même temps, la mise en place de l'environnement informatique global du TGCC, défini par le CEA, a été finalisé : systèmes de stockage et de gestion des données, services réseau de type « DEISA », supervision de la sécurité et infrastructure de services généraux, indispensables à une utilisation efficace et complète d'un centre de calcul de très haute performance. L'architecture « orientée données » de cet environnement permet aux utilisateurs de tirer pleinement profit de la puissance des supercalculateurs. En particulier, les développements réalisés autour de la migration, automatique et transparente pour l'utilisateur, des données depuis le système de fichier Lustre mutualisé vers le HSM (système d'archivage sur bandes) ont été mis en place au TGCC, ainsi que les utilitaires associés.

Côté CCRT, en tant qu'opérateur des moyens GENCI de Tier1, **différentes architectures de calculateurs** (parallèles, vectoriels et hybrides) ont été mises à disposition des utilisateurs français :
• le calculateur hybride BULL, **TITANE**, comprenant 1068 nœuds de calculs généralistes à base de processeurs Intel Xeon/Nehalem (100 Tflop/s), dont 96 sont équipés d'accélérateurs GPU Nvidia (192 Tflop/s)
• la plateforme vectorielle **NEC-SX9** (4,8 Tflop/s), entièrement dédiée à la communauté du climat pour permettre à la France de tenir ses engagements dans le projet GIEC.

Dès mi-2011, la production croissante des données liées au projet GIEC et l'objectif de porter les simulations relatives à la climatologie des plates-formes vectorielles vers les machines scalaires, CURIE en particulier, a nécessité la migration des données vers l'environnement du TGCC. Un cluster de dépouillement, installé au plus près des données, complète les services proposés aux utilisateurs pour le traitement des résultats de simulation.

Une équipe mutualisée exploite désormais le TGCC et le CCRT, soit une quinzaine de personnes assurant la hotline, l'assistance et le support pour les utilisateurs sous le pilotage d'un responsable opérationnel et d'un responsable du support applicatif CEA. L'administration système de l'ensemble des équipements est maintenant réalisée par les équipes CEA.
Une cinquantaine d'experts CEA en calcul intensif, mutualisés au niveau du complexe de calcul, définissent les évolutions des centres de calcul, participent à la R&D de certains sous-ensembles et travaillent à l'optimisation énergétique. Ainsi l'énergie dégagée par les supercalculateurs du TGCC est-elle utilisée pour chauffer le bâtiment.

Par ailleurs, le CCRT, en tant que centre de calcul ouvert à des partenariats industriels, favorise les échanges et les collaborations entre le monde de la recherche académique et celui de l'industrie dans le domaine de la simulation numérique haute performance. Dans le cadre de ce partenariat industriel, un nouveau supercalculateur de 200 Tflop/s sera installé en 2012.

Des **formations** sont périodiquement proposées pour permettre aux utilisateurs de tirer pleinement parti des architectures mises en œuvre sur le centre de calcul. En 2011 une session sur la programmation parallèle (MPI, OpenMP…), et deux autres sur l'environnement de développement Cuda et HMPP ont été organisées. L'école d'automne PRACE a également eu lieu au TGCC en 2011 (voir p. 27).
Concernant l'animation scientifique, la **8e édition des journées scientifiques CCRT** a rassemblé plus de 120 participants, le 20 octobre 2011 au TGCC, sur le thème « Simulation et flots de données ». Cette journée a permis d'échanger sur les besoins de communautés d'utilisateurs comme celles du climat, de l'analyse du génome, de l'astrophysique ou de l'ingénierie nucléaire.



L'entrée du Très Grand Centre de calcul du CEA, à Bruyères-le-Châtel © CEA



Maîtrises d'œuvre : vitalité au CINES

Durant l'année 2011, le CINES (Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur) a renforcé son action dans ses deux missions statutaires : le calcul numérique intensif et l'archivage pérenne de données électroniques.

Dans le domaine du **calcul**, si l'année 2011 n'a pas coïncidé avec de gros investissements pour augmenter la puissance des supercalculateurs, elle a permis des avancées pour les équipements du Centre :

• Après la construction en 2009-2010 d'un nouveau « pôle énergie », la construction d'une nouvelle salle machine de 600 m^2 a été décidée pour accueillir les futures générations de supercalculateurs.

Ces travaux s'accompagneront de l'installation d'équipements électriques et de climatisation performants qui limitent l'empreinte environnementale par la prise en compte des technologies de « free cooling » et de refroidissement des processeurs par de l'eau tiède.

• La collaboration avec IBM sur le « green computing » et les systèmes de fichiers parallèles a permis le remplacement des nœuds Power 5 par des Power 7, mis à disposition des utilisateurs début 2012. La configuration du cluster « Yoda » est dorénavant composée de 8 nœuds intégrant chacun 32 processeurs Power 7, disposant individuellement de 128 Go de mémoire et interconnectés par de l'Infiniband.

• Fruit d'une collaboration avec Bull et Serviware, un environnement de pré-post traitement a été installé avec notamment des fonctionnalités de visualisation à distance. La plate-forme « Cristal » qui supporte cet environnement est basée sur des noeuds BullX équipés de processeurs Nehalem, dotés chacun de 256 Go de mémoire et de 4 GPUs (Quadro FX5800, disposant de 4 Go de mémoire). Les logiciels Paraview, Ensight et Visit sont installés sur la plate-forme.

• Depuis 2011, un lien Renater à 10 Gigabits/s dédié relie le CINES aux deux autres sites nationaux ainsi qu'au réseau des supercalculateurs des autres pays de l'Union (ancien réseau DEISA).

JADE a fourni 150 millions d'heures en 2011
© CINES

Le CINES, en tant que partenaire de GENCI, poursuit son investissement dans les différentes phases des projets PRACE. Ses équipes ont activement contribué, aux côtés des chercheurs, au tremplin de codes stratégiques vers les Tier0 (NEMO en climatologie et NSMB en mécanique des fluides).

Le CINES est également intégré aux appels à projets DECI, ouverture des Tier1 aux projets européens, au cours desquels plus de 5 millions d'heures ont été distribués sur Jade. Un prototype « Exascale IO », dont les matériels sont installés au CEA et au CINES, permet d'étudier une technologie prometteuse pour des I/O performantes, nécessaires aux futures configurations multi-pétaflopiques et exaflopiques.

Enfin, en marge des projets PRACE, le CINES développe et héberge, pour PRACE AISBL, l'outil en ligne de peer review (voir page 24).

Concernant les **grandes masses de données**, en particulier leur conservation à moyen et long terme :

• Le CINES a obtenu l'agrément du Service Interministériel des Archives de France (SIAF) pour sa plate-forme d'archivage (archives intermédiaires). Il offre ainsi aux communautés scientifiques une vraie solution à leur problème de conservation des données stratégiques (documentaires ou issues d'observations ou de calculs). Le Centre est notamment partenaire de l'Equipex GEOSUD (« GEOInformation for SUstainable Development »), piloté par le Cemagref, pour l'archivage d'images satellites à haute définition.

• Le CINES est le nœud français de Eudat, « European Data for e-science », projet européen de 3 ans démarré le 1er octobre 2011 et regroupant 23 partenaires dont l'objectif est de mettre en place en Europe une infrastructure de données collaborative (CDI) inter-disciplinaire pour le partage, la duplication et la conservation à long terme des grandes masses de données. En tant que nœud français de Eudat, le CINES offre des capacités de stockage, de réplication à distance et de conservation à long terme de grandes masses de données à toutes les communautés qui le souhaitent.

• Le CINES co-pilote le groupe de travail sur l'archivage pérenne dans le cadre du projet d'infrastructure BSN (Bibliothèque Scientifique Numérique) mis en place par le Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche, dont un des objectifs pourrait être de labelliser et soutenir des projets d'archivage.



Maîtrises d'œuvre : continuité à l'IDRIS

L'Institut du développement et des ressources en informatique scientifique (IDRIS), situé à Orsay, est le centre majeur du CNRS pour le calcul numérique de haute performance. Il permet à près d'un millier d'utilisateurs, travaillant sur plus de trois cents projets émanant de quasiment toutes les disciplines scientifiques, d'accéder à ses ressources composées en 2011 de trois supercalculateurs (voir encadré).

Les ressources de l'IDRIS en 2011

• **VARGAS, une machine IBM de type SMP à nœuds larges de 112 fois 32 processeurs Power 6,** pour une configuration totale de 3584 processeurs et environ 17,5 To de mémoire globale, délivrant une puissance crête cumulée de 68 Tflop/s ;
• **BABEL, une machine IBM massivement parallèle de type BlueGene/P de 10240 processeurs quadri-cœurs**, soit en tout 40960 cœurs, avec environ 20 To de mémoire globale, pour une puissance crête cumulée de 139 Tflop/s ;
• **BRODIE, une machine vectorielle NEC SX-8 de 10 nœuds de 8 processeurs vectoriels**, soit au total 80 processeurs délivrant une puissance crête cumulée de 1,3 Tflop/s. Installé en 2006, BRODIE a définitivement été arrêté fin 2011.

En 2011, l'actuel parc de machines a continué d'être exploité, dans l'attente de son renouvellement escompté à partir du second semestre de 2012.
En 2011, toujours, la diversification de l'utilisation de BABEL par les différentes communautés scientifiques s'est poursuivie, gage important pour la préparation des applications aux évolutions technologiques à venir. S'il n'y a donc pas eu, en 2011, d'évolutions matérielles concernant les moyens de calcul, l'IDRIS a néanmoins consolidé, ainsi qu'il y procède à intervalles réguliers, les CAPACITÉS DE TRAITEMENT ET DE STOCKAGE DE SA MACHINE D'ARCHIVAGE afin de suivre la croissance continue des besoins de stockage de ses utilisateurs.

Fin 2011, pour assurer ses missions, l'IDRIS comptait 34 personnes, essentiellement réparties entre les équipes en charge du bon fonctionnement matériel et logiciel des supercalculateurs et de toutes les machines de service qui leur sont associées, et une équipe de support aux utilisateurs qui assure, outre une permanence d'assistance, une expertise pour le support applicatif sur projets, un programme ambitieux de formation, une tâche continue de documentation et une veille technologique sur tous les aspects applicatifs du calcul intensif.

Ainsi qu'il le fait depuis sa création, l'IDRIS a continué de proposer un PROGRAMME TRÈS SOUTENU DE FORMATIONS à destination de ses utilisateurs et au-delà, puisque ses sessions sont ouvertes non seulement à l'ensemble du monde académique, utilisateur ou non de ses ressources informatiques, mais également aux représentants du monde industriel.
Au cours de l'année 2011, une vingtaine de sessions d'une à quatre journées chacune ont été organisées par l'IDRIS soit dans ses locaux d'Orsay soit dans d'autres sites en région parisienne ou en province, pour un total de plus de trois cents participants. La plupart de ces sessions ont été consacrées aux langages de programmation scientifiques et aux principaux paradigmes de programmation parallèle (MPI, OpenMP et programmation hybride MPI/OpenMP, qui va devenir une clé pour l'utilisation efficace des futures machines qui comporteront un grand nombre de cœurs par nœud de calcul).

La forte implication de l'IDRIS, depuis le début des années 2000, dans les PROJETS EUROPÉENS DU DOMAINE DU CALCUL DE HAUTE PERFORMANCE s'est poursuivie en 2011, via le projet DEISA2 qui s'est terminé mi-2011 après sept années d'intenses activités, à la fois pour le déploiement à l'échelle européenne de services communs sur les supercalculateurs des partenaires du projet et pour le support applicatif des projets auxquels des ressources avaient été allouées dans le cadre d'appels à projets européens propres à cette infrastructure.
Parallèlement, l'IDRIS a continué à être impliqué durant cette année dans les projets visant à soutenir le déploiement de l'infrastructure européenne de calcul intensif PRACE (voir page 24).



Le supercalculateur BABEL
© CNRS

Vous avez dit **petaflop/s** ?



Une journée pour les utilisateurs du calcul intensif

Le colloque «Petaflop/s mode d'emploi», organisé le 19 mai 2011 à Paris par GENCI, avait pour objectifs de faire le point sur les premières expériences de calcul pétaflopique et leur apport scientifique et de répondre aux questions sur PRACE et CURIE.

Près d'une centaine de scientifiques, grands utilisateurs français du calcul intensif et jeunes chercheurs, ont répondu à l'invitation de GENCI et participé au colloque « Petaflop/s mode d'emploi ». Cette journée, qui s'est déroulée le 19 mai 2011 dans les locaux de la Maison de la Chimie à Paris, leur a permis d'échanger sur le bénéfice et les avancées attendus du calcul à l'ère pétaflopique (en termes de simulations frontières ou de résolution de problèmes ouverts, par exemple) ainsi qu'autour de questions plus pratiques : accéder à distance, optimiser son code, progresser dans l'utilisation du parallélisme extrême.

Autre objectif : faire le point sur les ressources de l'infrastructure européenne PRACE (voir page 24) et présenter CURIE, le supercalculateur pétaflopique français, ouvert depuis le 1er janvier 2011 aux scientifiques français et européens (voir page 34).

Une journée bien rythmée

Plusieurs présentations se sont succédées tout au long de la journée pour illustrer les bénéfices scientifiques que les supercalculateurs pétaflopiques permettent d'espérer. La démonstration a été réalisée dans différents domaines scientifiques : l'astrophysique, la climatologie, la mécanique des fluides, les hautes énergies, les plasmas laser, les sciences de la vie et la dynamique moléculaire.



© Mbzt - Creative Commons

Une table ronde réunissant cinq des lauréats du prix Bull-Fourier (voir page 12) et des présentations de posters ont également favorisé les échanges entre participants sur ce qu'implique l'accès aux ressources pétaflopiques en termes, par exemple, de passage à l'échelle, de nouvelles méthodes, de nouvelles applications...

Enfin, la présentation, par GENCI, de PRACE et de CURIE a permis d'encourager les chercheurs à soumettre des projets en réponse aux appels à proposition émis par PRACE.

Un partage d'expérience réussi

Durant cette journée, les échanges ont été nombreux et fertiles, qu'il s'agisse de l'accès aux ressources pétaflopiques ou de questions plus techniques sur le portage des codes, par exemple. Ce partage d'expérience réussi a mis en évidence qu'il était nécessaire d'accompagner les équipes de recherche, donc de pérenniser un rendez-vous annuel.

GENCI organise, fin 2012, une nouvelle journée de débats pour faire le point sur l'état de l'art et favoriser les échanges entre communautés scientifiques.

Cette journée a également permis aux scientifiques présents d'exprimer un certain nombre de besoins. Outre une information plus systématique sur PRACE, tous ont appelé de leurs voeux une réflexion approfondie sur l'évolution des outils qui permettent la visualisation à distance, le pré et le post-traitement, ainsi que sur les systèmes de stockage et de gestion des données. Objectif : faire face à l'augmentation des données générées par la simulation.



Collaborations scientifiques
Pour technologies de pointe

En 2011, comme en 2010, GENCI s'est activement impliqué dans deux collaborations majeures de recherche et développement. Objectif : mettre à disposition des scientifiques français les meilleurs outils de simulation.

CAPS ENTREPRISE

Initiée en 2009 et renouvelée en 2010, la collaboration avec CAPS Entreprise s'est poursuivie, pour la dernière année, en 2011. Comme les deux années précédentes, elle a principalement concerné le portage et l'optimisation sur machines hybrides d'applications scientifiques. Les applications sont choisies sur la base d'un appel à projets annuel, géré conjointement par GENCI et CAPS.

Lancé fin 2010 et clos le 18 mars 2011, le troisième appel à projets a permis de sélectionner cinq applications dans des domaines très variés : astrophysique, chimie quantique, environnement (propagation des feux de forêt), dynamique des fluides et sciences du vivant.

Durant sept mois, les équipes de CAPS ont travaillé, en liaison étroite avec les scientifiques concernés, à l'adaptation de leur application pour démontrer les gains obtenus par le passage sur machine hybride. Résultat : trois des cinq applications ont vu leurs performances très significativement augmentées, d'un facteur 16 pour l'une d'entre elles ! Pour les deux autres applications, le passage sur accélérateur graphique n'a pas permis de gains aussi importants.

L'ensemble de ces résultats a été présenté en décembre 2011 et les codes sources modifiés des applications ont été livrés aux équipes scientifiques.

Du graphique dans les applications

En électronique, l'hybridation consiste à assembler deux puces ou deux composants différents en vue d'obtenir une fonction combinée ou un assemblage plus dense.

Dans le domaine du calcul intensif, on parle de **machine hybride** lorsque celle-ci combine des cœurs de calcul classiques (CPU ou Central Processing Unit) et des cœurs de calcul graphiques (GPU ou Graphics Processing Unit).

Pour les applications compatibles, les cœurs de calcul graphiques ont l'avantage d'**accélérer fortement leur exécution**.

ECR (EXASCALE COMPUTING RESEARCH) LAB

Associant le CEA, GENCI, Intel et l'Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines, **ECR Lab**, laboratoire européen de recherche sur l'exascale, a pour objectif de contribuer à préparer les architectures matérielles et logicielles nécessaires à l'arrivée de l'exascale vers 2020 (voir ci-contre). Des défis technologiques majeurs doivent être relevés : il s'agit d'augmenter les performances de calcul d'un facteur 1000 sans alourdir l'empreinte énergétique des futurs supercalculateurs : c'est une véritable rupture technologique.

ECR Lab mène deux activités de recherche. D'une part, en partenariat avec leurs concepteurs, académiques comme industriels, il travaille sur des applications existantes pour les adapter et les optimiser au regard des contraintes attendues avec l'exascale (c'est le co-design). Ses efforts se concentrent notamment sur l'utilisation de modèles de programmation adaptés aux architectures, sur la gestion des flux de données et la scalabilité des performances de l'application. Les collaborations actuelles concernent la géophysique et les sciences de la vie avec des partenaires à la fois issus du monde de la recherche et de l'industrie.

D'autre part, L'ECR Lab développe également des outils logiciels visant à caractériser et optimiser les performances des applications scientifiques en vue des prochains systèmes exascale. Ces outils permettront aux développeurs d'améliorer le parallélisme, la scalabilité, les performances de calcul et le niveau de consommation electrique de leurs applications. Ils aideront également les concepteurs de matériels et les experts en compilation à optimiser leurs produits.

La plupart des outils mis au point par ECR Lab auront été publiés en Open source en 2012.

La **participation de GENCI** à ECR Lab s'inscrit dans une double démarche : anticiper la rupture technologique et préparer les scientifiques français à l'arrivée de l'exaflop/s.

www.exascale-computing.eu

Premiers **succès** pour **ECR Lab**

En 2011, les travaux du laboratoire ont permis des avancées majeures

Retour sur les résultats obtenus par ECR Lab, lancé fin 2009 par le CEA, GENCI, Intel et l'Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines, et qui contribue à préparer les architectures matérielles et logicielles nécessaires à l'arrivée de l'exascale vers 2020.

En 2011, les travaux d'ECR (Exascale Computing Research) Lab ont permis des avancées majeures dans les deux domaines de recherche où il intervient : le co-design d'applications scientifiques et le développement d'outils logiciels.

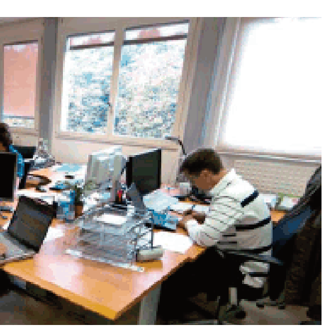
ECR Lab est fort aujourd'hui d'une équipe de plus de trente chercheurs internationaux au large éventail de compétences, soutenus par les experts des organismes co-fondateurs (CEA, Intel, UVSQ).

Simulations plus complexes

ECR Lab a travaillé avec le Laboratoire de Chimie et Physique Quantique (CNRS/Université de Toulouse) et l'UVSQ pour optimiser QMC=Chem, un code de simulation Monte Carlo pour des applications dans le domaine de la chimie. Conçu par Michel Caffarel et Anthony Scemama, ce code permet, par exemple, de faire la lumière sur les processus moléculaires complexes à l'œuvre dans la maladie d'Alzheimer.



En utilisant deux des outils développés par ECR Lab (MAQAO et DECAN), les performances du code ont pu être significativement augmentées d'un facteur 4 et permettent désormais de pouvoir tirer parti de plus de 32 % de la puissance crête d'un processeur tel que celui qui équipe CURIE. Fin 2011, le Grand Challenge réalisé sur le supercalculateur CURIE (voir pages 2 et 3) a démontré la très bonne tenue du code jusqu'à 76000 cœurs de calcul, équivalant à une puissance soutenue de près d'un petaflop/s. Ce résultat est une première étape essentielle pour utiliser les simulations pétaflopiques comme outil d'exploration du monde microscopique, avec une précision inégalée.



Efficacité et scalabilité

ECR Lab travaille également à améliorer significativement la manière dont les applications parallèles sont programmées et exécutées efficacement sur les systèmes actuels et à venir.
Réduire les besoins en mémoire, augmenter les performances de l'application et sa scalabilité sur un très grand nombre de cœurs, ce sont les domaines explorés en utilisant MPC, un intergiciel (middleware) pour l'exécution parallèle développé initialement par le CEA. La scalabilité de MPC a été démontrée sur le supercalculateur Tera100 du CEA en testant l'application EulerMHD sur plus de 75000 cœurs, ce qui constitue une étape majeure pour augmenter à l'avenir son efficacité sur les centaines de milliers de cœurs qui composeront les futurs systèmes exascale. MPC a été porté sur la nouvelle architecture « Many Integrated Core » d'Intel.

Exploration plus fine

Dans le secteur de l'énergie (pétrole et gaz), ECR Lab travaille avec des partenaires industriels à l'adaptation des applications d'exploration du sous-sol et à la mise au point de nouvelles méthodes pour répondre aux attentes du secteur en 2020. Des résultats significatifs sont attendus.

Gains en temps de simulation

Enfin, ECR Lab travaille avec la direction des sciences du vivant du CEA (CEA/DSV) sur POLARIS, un code de simulation moléculaire développé par Michel Masella. Ce code présente un grand intérêt pour les firmes pharmaceutiques pour identifier plus rapidement et cibler avec une grande précision les molécules qui pourraient faire l'objet d'une production et de tests in vitro.
Des gains très importants en temps de simulation ont été ainsi réalisés, ouvrant la voie à un criblage accéléré des molécules et donc à la production plus rapide de nouveaux médicaments.



Démultiplier

Infrastructure PRACE

Vers une Europe du calcul intensif

Avec la montée en puissance de l'infrastructure européenne de calcul intensif PRACE, dans laquelle GENCI représente la France, l'Europe marque des points face aux autres grandes puissances dans le monde.

Quinze petaflop/s au total... C'est ce que PRACE, l'infrastructure européenne de calcul intensif, mettra à disposition des chercheurs académiques et des industriels européens fin 2012. Cette puissance de calcul est largement équivalente au supercalculateur le plus performant du moment, la machine japonaise K qui a atteint la dizaine de petaflop/s selon le dernier classement du Top 500 en novembre 2011.

PRACE doit cette réussite à l'engagement pris et tenu par quatre de ses pays membres (l'Allemagne, l'Espagne, la France et l'Italie) de mettre à disposition des scientifiques européens des supercalculateurs de très grande puissance, dans l'objectif de favoriser des avancées scientifiques majeures et de soutenir la compétition scientifique internationale.

PRACE, ce sont aujourd'hui six supercalculateurs, aux architectures complémentaires, d'une puissance crête globale de 15 petaflop/s, et localisés en Allemagne, en Espagne, en France et en Italie, accessibles indépendamment du lieu où ils sont situés.

L'engagement de la France, représentée par GENCI dans PRACE, s'est concrétisé par l'acquisition et l'installation du supercalculateur CURIE durant l'année 2011 (voir page 34).

Durant l'année 2011, et conformément à sa feuille de route, PRACE a organisé deux **appels à projets réguliers** (Regular Project Access Calls), en mai et en novembre.

Au terme du Project Access Call organisé en mai 2011 et dont les résultats ont été annoncés en octobre de la même année, 721 millions d'heures ont été attribués à 24 projets sélectionnés pour leur très grande qualité scientifique.

Selon les premiers résultats de l'appel suivant, organisé en novembre 2011 et dont les résultats ont été annoncés en avril 2012, le nombre de projets sélectionnés a quasiment doublé (43), signe de la vitalité de l'infrastructure européenne. Et trois projets français se classent dans le « Top Ten » des projets sélectionnés.

Globalement, depuis son tout premier appel à projets (Early Call) en mai 2010, PRACE a alloué près de 3000 millions d'heures à une centaine de projets, parmi lesquels les projets français figurent en bonne place (voir page 27).

Comme en 2010, PRACE a également organisé, tout au long de l'année 2011, un appel continu dit préparatoire (Preparatory Access Call) qui permet aux scientifiques, sur la base d'une sélection trimestrielle et pour quelques centaines de milliers d'heures seulement, de tester ou d'améliorer la scalabilité de leurs codes.

Bénéficier d'un Preparatory Access Call s'avère souvent déterminant, avant de passer au petaflop/s.

Les projets retenus dans ce cadre sont soumis à une évaluation technique et peuvent bénéficier d'un support applicatif. Une nouvelle fois, les projets français se distin-

L'infrastructure européenne de calcul intensif PRACE (Partnership for advanced Computing in Europe) a officiellement été créée au printemps 2010 sous la forme d'une association internationale sans but lucratif (AISBL) de droit belge.
Au 1er mars 2012, PRACE regroupe 24 pays membres : l'Allemagne, l'Autriche, la Bulgarie, Chypre, le Danemark, l'Espagne, la Finlande, la **France (représentée par GENCI)**, la Grande-Bretagne, la Grèce, la Hongrie, l'Irlande, Israel, l'Italie, la Norvège, les Pays-Bas, la Pologne, le Portugal, la Serbie, la Slovénie, la Suède, la Suisse, la Tchéquie et la Turquie.


Maria Ramalho, directeur exécutif de PRACE
© BSC

guent (voir également page 27).

En 2011, PRACE a poursuivi son **développement opérationnel**, assuré, depuis l'origine, par des projets financés par la Commission Européenne. Ces projets, qui se succèdent dans le temps depuis 2008 (voir encadré), ont pour mission d'accompagner le déploiement de PRACE dans toutes ses composantes.
Signe d'une certaine maturité de l'organisation, un directeur exécutif de PRACE a été nommé en septembre 2011 et une équipe est en cours de constitution.

En 2011, PRACE a également été très actif dans le domaine de la **formation**. Outre les quatre écoles saisonales organisées dans l'année, dont une en France à l'automne 2011 (voir page 27), PRACE a entrepris de renforcer significativement son offre en labellisant six centres de formation avancée en calcul intensif (PRACE Advanced Training Centers - PATC).

Parmi ces six centres, figure le projet soutenu par GENCI et porté par la Maison de la simulation avec les trois centres nationaux de calcul (TGCC/CCRT, CINES, IDRIS) et Inria. Objectif : former, de façon coordonnée, les utilisateurs aux techniques de calcul intensif à l'échelle pétaflopique pour qu'ils exploitent au mieux les supercalculateurs déployés dans le cadre de PRACE.
Les premières formations dispensées dans le cadre des PATC ont eu lieu en avril 2012.

Autre fait marquant de l'année écoulée : la création d'un f**orum des utilisateurs des moyens de PRACE**. Indépendant de la gouvernance de PRACE, ce User Forum a pour but de favoriser les échanges entre les utilisateurs et PRACE.

Lors du DEISA-PRACE Symposium à Helsinki le 13 avril 2011, une première réunion avait permis de valider le concept et, de manière générale, l'organisation ainsi que le fonctionnement du User Forum.
Á Bruxelles le 1er décembre 2011, le comité de programme du User Forum, l'instance chargée de le faire vivre, a été créé.
Constitué sur la base d'un appel à candidatures auprès des porteurs de projets retenus dans le cadre des appels PRACE, ce Programme Committee compte une quizaine de membres, représentants des grandes disciplines scientifiques. Deux scientifiques français en sont membres : Jérémie Bec, de l'Observatoire de la Côte d'Azur, et Gabriel Staffelbach, du CERFACS.

Le 2e User Forum s'est tenu le 14 mars 2012 à Dublin (Irlande), en marge d'une réunion consacrée à l'actualisation du Scientific Case.

Rédigé initialement en 2007/2008, le **Scientific Case** constitue un document de référence, qui présente

Trois projets successifs

Le **projet PRACE-1IP** (PRACE First Implementation Phase Project) a officiellement été lancé le 1er juillet 2010 pour deux ans (2010-2012). Il fait suite au projet PRACE-PP (PRACE Preparatory Phase Project) qui avait notamment permis, entre 2008 et 2010, de définir les contours de la future PRACE AISBL.
Depuis le 1er septembre 2011 et pour deux ans (2011-2013), PRACE-1IP est complété par le projet **PRACE-2IP** (PRACE Second Implementation Phase Project) dont les objectifs sont à la fois de renforcer le soutien opérationnel à PRACE, en particulier sur les aspects applicatifs et de prototypage (prospective technologique), et d'intégrer, sous l'égide de PRACE, les activités d'échanges entre centres nationaux Tier-1 issus du projet DEISA.
Ces deux projets bénéficient, chacun, d'un financement de la Commission européenne d'un montant de 20 M€, dans le cadre du programme « Infrastructures » du 7e PCRD.
PRACE-2IP sera suivi par le projet **PRACE-3IP** (PRACE Third Implementation Phase Project) qui a été présenté à la Commission Européenne fin 2011.


Réunion d'avancement de PRACE-1IP et de lancement de PRACE-2IP à Barcelone en Espagne, du 14 au 16 septembre 2011 © PRACE



la somme des besoins en calcul intensif dans les domaines scientifiques et industriels, envisagés à l'aune du petaflop/s.
Conduite début 2012, l'actualisation du Scientific Case porte sur le multi-petaflop/s et l'exflop/s en lien avec EESI (voir page 29).

Autre temps fort de l'année écoulée, le **3e séminaire industriel de PRACE** organisé les 28 et 29 mars 2011 à Stokholm en Suède, après Amsterdam (Pays-Bas) en 2008 et Toulouse (France) en 2009 : ces deux journées ont réuni plus de 80 participants venus de 22 pays européens et représentant près de quarante entreprises.
De grands groupes industriels comme Saab, Renault, ABB et Airbus ont répondu à l'invitation de PRACE, mais également des PME telles que Rila, Vratis, EURO/CFD, et Vestas. Editeurs de logiciels (CD-Adapco, ANSYS, ESI Group, Numtech, par exemple) et vendeurs de calcul intensif (AMD, Cray, IBM, Intel, Numascale, Southpole et Supermicro) étaient également présents.
Sur la base d'une série de conférences et de sessions de réflexion, ce séminaire visait à rapprocher utilisateurs académiques et industriels du calcul intensif en mettant les ressources et l'expertise de PRACE en regard des besoins des entreprises. Dans le prolongement de ces dicussions, la réflexion sur l'**ouverture des moyens de PRACE aux industriels** s'est poursuivie, avec la sélection d'un projet pilote. Avec son projet baptisé noFUDGE, et destiné à qualifier de nouveaux outils numériques pour le design des futurs moteurs d'avion, Cenaero, centre belge de recherche appliquée, a bénéficié de deux millions d'heures de calcul, sur JUGENE à Jülich en Allemagne, dans le cadre d'un Preparatory Access.
Cette expérience pilote a permis à PRACE de définir les contours de son « offre industrielle » qui sera mise en œuvre lors du 5e Project Access Call lancé en avril 2012.

Appel à projet
2 sessions par an ; dépôt des dossiers sur **https://prace-peer-review.cines.fr**

Analyse administrative
Vérification des dossiers par **PRACE**

Evaluation technique
Analyse par les **centres Tier0**

Evaluation scientifique
3 **panels d'experts** : chimie, matériaux, médecine et sciences du vivant ; astrophysique et physique fondamentale ; sciences de la terre, environnement, mathématiques, informatique, engineering et énergie

Priorisation
Arbitrage par l'**Access Committee** des priorisations effectuées par chaque panel d'experts

Attribution des heures
Sur la base des propositions de l'Access Committee par l'**AISBL** et les **pays hébergeurs**

PRACE premiers pas...



Si PRACE réussit bien aux scientifiques français (voir page ci-contre), la concurrence reste rude pour accéder aux moyens de calcul de l'infrastructure. Ainsi, un peu plus d'un quart seulement des projets déposés lors des quatre premiers appels à proposition ont été retenus par PRACE au terme d'un processus de sélection rigoureux (voir explication ci-contre).
Bien préparer son projet s'avère donc indispensable, au moins trois mois avant l'ouverture par PRACE de son appel à projets :
- Il convient de dimensionner précisément le nombre d'heures de calcul nécessaire. Les moyens de calcul pétaflopiques permettent d'envisager des simulations de très grande taille sur une large échelle de temps. Il n'est pas impossible de demander plusieurs dizaines de millions d'heures si le projet le nécessite.
- L'excellence scientifique constituant le critère majeur de sélection, il est essentiel de démontrer que son projet est scientifiquement innovant et que les résultats attendus permettront de faire grandement progresser la connaissance. Une importance particulière doit être accordée à la rédaction de cette partie.
- Pour autant, il ne faut pas sous-estimer la partie technique de son projet : la vérification du passage à l'échelle des codes est déterminante et des critères minima de scalabilité sont fixés pour chaque machine. Avoir bénéficié d'un Preparatory Access est un plus, car cela garantit la « bonne tenue » du code.
- Enfin, la forme compte également. La qualité de la présentation est étudiée à la loupe par le panel de sélection.

Plus d'une dizaine de projets français ont été sélectionnés par PRACE depuis deux ans (voir ci-contre) : il peut être utile de contacter les porteurs de projets pour prendre conseil auprès d'eux comme de consulter la liste des projets retenus par PRACE, publiée sur son site web ; il est également recommandé d'envoyer un mail à GENCI à l'adresse dédiée : **prace-appels@genci.fr**

? **www.prace-ri.eu**

La France dans PRACE



Des éléments de bilan très positifs

Grâce à l'implication de GENCI et de ses partenaires (CEA, CINES, CNRS et INRIA), la France occupe une place de choix dans PRACE. Avec de très bons résultats obtenus lors des appels à projets PRACE et l'organisation d'une formation de pointe sur CURIE.

Sur les quatre appels à projets, organisés par PRACE depuis 2010, la France et l'Allemagne sont leaders en nombre de projets retenus, ce qui traduit le dynamisme de leurs communautés scientifiques.

Quatre **Project Access Calls** ont été organisés par PRACE entre mai 2010 et mai 2011. Si on comptabilise les projets en fonction de l'appartenance de leur leader à un organisme français de recherche, la France a bénéficié de 20 % des projets retenus, avec un taux de succès de 38 % environ.
Au total, durant cette période, 171 dossiers ont été déposés dont 31 français et 60 projets ont été retenus dont 12 français.

Avec respectivement 20 % et 22 % des projets retenus, France et Allemagne sont donc les principaux bénéficiaires des allocations de PRACE. Près d'un quart des projets retenus (23 %) proviennent de pays qui n'hébergent pas de supercalculateur pétaflopique et 13 % du seul Royaume-Uni.

Projet	France	Allemagne	Italie	Espagne	UK	Autres	Total
Early Call (mai 2010)	0	5	1	0	2	2	10
First Call (juin 2010)	1	2	0	2	1	3	9
Second Call (novembre 2010)	6	2	0	2	3	4	17
Third Call (mai 2011)	5	4	4	4	2	5	24
Total	**12**	**13**	**5**	**8**	**8**	**14**	**60**
En %	**20**	**22**	**8**	**13**	**13**	**23**	

Dans le cadre des **Preparatory Access Calls,** 46 projets au total ont été retenus dont 21 français, soit un taux de succès de 46 % pour la France qui se place en première position.

Quatre fois par an depuis 2008, PRACE organise des écoles saisonales à destination des chercheurs désireux de s'aguerrir à la pratique du petaflop/s.

Co-organisée par GENCI et le CEA, l'**édition 2011 de la PRACE Autumn School** s'est déroulée du 25 au 27 octobre, dans les locaux du Très Grand Centre de calcul du CEA. Consacrée à la « Programmation hybride avancée », la PRACE Autumn School a réuni une quizaine de participants pour moitié d'autres pays européens (Allemagne, Espagne, Finlande, Italie, Suisse, et Turquie). L'occasion pour eux de toucher du doigt, pour la première fois, les possibilités offertes par le supercalculateur CURIE (voir page 34).
L'occasion également de tester, avec une PME française, la validité de ce modèle de formation dans la perspective d'une extension européenne de l'Initiative HPC-PME (voir page 30).

Alternant cours et travaux pratiques durant trois jours, les différentes sessions, animées tour à tour par le CEA, NVIDIA, BSC, Allinea et CAPS avaient pour objectif de donner les clefs d'une programmation hybride réussie, en présentant les outils les plus récents à disposition et en les mettant en pratique.





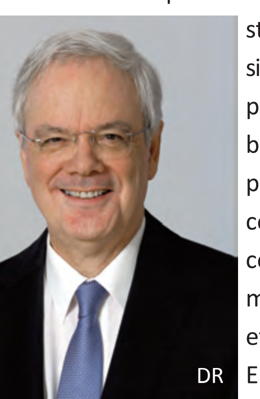
PRACE, à la croisée

Le calcul intensif, avenir de l'Europe

Achim Bachem, président du Conseil de PRACE, et Catherine Rivière, PDG de GENCI, reviennent sur la genèse de PRACE et les enjeux que doit relever l'infrastructure européenne de calcul intensif, au bénéfice de l'Europe.

Quels sont les objectifs de PRACE?

Achim Bachem : Initié en 2007, PRACE compte désormais 24 pays membres. PRACE a pour mission de créer une infrastructure de calcul intensif, pérenne et de premier plan, ouverte à l'ensemble des chercheurs européens, pour soutenir la compétitivité de notre continent dans les domaines de la recherche et de l'industrie.


DR

En 2010, nous avons déployé nos premières ressources de calcul intensif en Europe, qui sont aujourd'hui mises à disposition par six centres Tier0. Il ne s'agit pas seulement de l'accès à des heures de calcul mais également d'une offre de services en matière de support utilisateurs et de formation. En janvier 2012, nous avons installé notre siège social à Bruxelles, ce qui renforce l'existence de PRACE.

Catherine Rivière : Fin 2012, PRACE permettra aux chercheurs européens d'accéder à une puissance crête globale de calcul d'environ 15 Petaflop/s, grâce à six supercalculateurs pétaflopiques installés en Allemagne, en Espagne, en France et en Italie.

Ce résultat permet à l'Europe de se positionner comme un leader international en termes de puissance de calcul. Ainsi, à titre de comparaison, le plus puissant supercalculateur du monde, actuellement exploité au Japon (le supercalculateur K), produit « seulement » 10 petaflop/s.

Les supercalculateurs, qui composent l'infrastructure PRACE, ont été conçus avec des architectures différentes mais complémentaires afin de couvrir l'ensemble des besoins des scientifiques. Répartis sur le territoire européen, ils permettent à chaque scientifique de choisir le supercalculateur le mieux adapté à ses travaux de recherche.

AB : PRACE constitue un élément fort de coopération et de coordination entre pays européens, et cela a produit de la valeur ajoutée dans bien des aspects. Nous en recueillons déjà les fruits, notamment dans le fait que les autorités politiques, dans beaucoup de pays européens, ont pris conscience de l'importance du calcul intensif et sont donc, en conséquence, en train de booster et de mieux structurer leurs équipements en calcul intensif.

Quel soutien PRACE offre-t-il aux chercheurs ?

AB : Le but de PRACE est d'offrir, en Europe, un accès indépendant au calcul intensif, considéré comme une des technologies clés du XXIe siècle. Sur le plan politique, les bénéfices attendus du calcul intensif pour la science et l'économie, dans chaque pays européen et à l'échelle du continent sont le leitmotiv de PRACE. En outre, les centres Tier0 qui seront partie prenante du développement de PRACE, gagneront en visibilité en tant que représentants nationaux d'une success story européenne.

CR : Le calcul intensif permet d'accroître la compétitivité des Etats dans les domaines scientifiques et industriels. En science, le calcul intensif est indispensable pour résoudre des questions majeures et complexes telle que la prédiction de l'évolution du climat. Dans l'industrie, le calcul intensif contribue, par exemple, à réduire le nombre de tests nécessaires pour concevoir un produit. PRACE doit continuer à promouvoir largement l'utilisation du calcul intensif auprès des chercheurs et des industriels.

Quelle est votre vision pour les années qui viennent ?

AB : PRACE doit être reconnu comme ouvrant la voie à des découvertes scientifiques de grande envergure ainsi qu'au développement de la recherche industrielle, dans toutes les disciplines, au bénéfice de la compétitivité européenne et de la société toute entière. Autre axe important : PRACE doit continuer à militer pour l'organisation d'un espace européen de la recherche et de l'innovation, dans lequel le calcul intensif est pleinement inséré. PRACE doit ainsi permettre aux industriels européens d'accéder à des systèmes de pointe. Plus encore, PRACE doit aider au développement des systèmes et des composants nécessaires à la conception des prochaines générations de supercalculateurs, en lien avec l'industrie du HPC en Europe.

CR : Le fait qu'en seulement trois ans, nous ayons travaillé collectivement et mis en place une structure opérationnelle est un succès en soi. PRACE donne les moyens à l'Europe de faire émerger un véritable écosystème autour du calcul intensif. Avec la communauté scientifique, avec les acteurs industriels, avec les instances nationales et internationales, cet écosystème permettra à nos laboratoires de recherche et, finalement, à nos entreprises d'accroître leur compétitivité. C'est un investissement capital pour l'avenir.



En route vers l'exascale

L'Europe de l'exascale est sur les rails

Définir un agenda européen pour préparer et tirer le meilleur parti des futures architectures exaflopiques attendues vers 2020, tel était l'objectif de l'European Exascale Software Initiative (EESI) dont GENCI était partie prenante.

Barcelone, 10 et 11 octobre 2011. Lors de la conférence finale de l'European Exascale Software Initiative (EESI), le constat est unanime : conformément aux objectifs du projet, l'Europe dispose désormais d'une feuille de route pour l'exascale assortie d'un ensemble de recommandations.
Durant dix-huit mois, plus de 150 experts européens du calcul intensif, y compris des développeurs de logiciels scientifiques et des utilisateurs, universitaires comme industriels, ont été mobilisés pour définir les meilleurs moyens de relever le défi de l'exascale.
Car c'est un immense défi de préparer les chercheurs et les industriels européens à l'arrivée de machines de plus en plus puissantes qui, vers 2015, seront capables de délivrer des centaines de petaflops/s (contre quelques uns actuellement) puis, vers 2020, au moins un exaflop/s.
Durant la durée du projet, financé par la Commission Europénne et dont GENCI a été activement partie prenante, une série de conférences et huit groupes de travail ont permis de déboucher sur plusieurs recommandations :

- mettre en place un projet multi-thématique dédié à l'exascale avec un agenda de recherche sur 20 ans, en collaboration avec les autres unités de recherche de la Commission Européenne et en lien avec les agences nationales de financement ;
- financer des projets dans les domaines où l'Europe est en bonne position ;
- se rapprocher d'initiatives existant ailleurs dans le monde dans les domaines où l'Europe semble plus faible ;
- miser sur des centres pluridisciplinaires pour permettre à la fois le développement de codes et d'algorithmes et l'essor de communautés scientifiques déjà structurées, comme la climatologie, les sciences de la vie ou l'énergie, qui participent aussi à la diffusion des connaissances ;
- Développer l'éducation et la formation dans le domaine du calcul intensif.

Parmi les réunions ayant contribué à formaliser ces recommandations et préparer la conférence finale de Barcelone, le séminaire (workshop) organisé par GENCI, les 29 et 30 juin 2011 au domaine du Tremblay (78) et qui a rassemblé une soixantaine d'experts européens.

www.eesi-project.eu

Le workshop des 29 et 30 juin 2011 en France © EESI

Alternant sessions plénières et groupes de travail...

Lancé le 1er juin 2010 pour 18 mois, EESI était piloté par EDF autour de 7 autres partenaires contractuels : GENCI pour la France, BSC (Espagne), CINECA (Italie), EPCC (Grance-Bretagne), Jülich (Allemagne), NWO (Pays-Bas) et ARTTIC, société française spécialisée dans le management de projets européens.ESSI s'est également appuyé sur 17 partenaires associés dont le CEA, le CERFACS, le CNRS, Inria, Ter@tec et Total.


À gauche, Stéphane Requena, responsable technique de GENCI



Initiative HPC-PME
Accélérateur d'innovation et d'emploi

Lancée conjointement par GENCI, Inria et OSEO en septembre 2010, l'Initiative HPC-PME a séduit près d'une vingtaine de PME désireuses de « passer au calcul intensif » pour gagner en compétitivité.

Outil essentiel de la recherche académique, l'utilisation de la simulation numérique par le calcul intensif s'avère également de plus en plus indispensable dans le domaine industriel pour réduire les temps de conception et de validation et favoriser l'innovation.

Si de grands groupes comme Airbus utilisent le calcul intensif depuis longtemps, cette démarche reste moins répandue dans les PME car elle nécessite des investissements importants en matériels et logiciels, en personnel, en formation...

Plus de simulation, moins de tests

Pour les avionneurs, le calcul intensif est une technologie stratégique qui permet d'optimiser les niveaux de performance d'un avion dans toutes ses composantes et d'en garantir la conception.
Ainsi, pour le design des ailes de son dernier-né, l'A350, Airbus a gagné 25 % en temps de développement et testé moitié moins de prototypes en soufflerie (baisse des coûts de 20 %) que lors de la conception de l'A380.
Cette même tendance s'observe chez Boeing : la firme de Seattle testait près de 80 prototypes d'ailes en soufflerie au début des années 80 ; elle n'en teste plus que 5 ces dernières années.
Informations tirées du projet EESI (voir page 29)

Portée par GENCI, Inria et OSEO, l'Initiative HPC-PME a pour objectif d'aider les PME à évaluer et démontrer les gains de productivité et de compétitivité qu'elles obtiendraient en « passant au calcul intensif ». Lancée le 1er septembre 2010, l'initiative HPC-PME est menée en partenariat avec quatre pôles mondiaux de compétitivité : Aerospace Valley (aéronautique, espace), Axelera (chimie et environnement), Minalogic (solutions miniaturisées intelligentes pour l'industrie) et Systematic (systèmes complexes).
En 2011, un cinquième pôle de compétitivité a intégré HPC-PME ; il s'agit de Cap Digital (contenus et services numériques).
En 2011, toujours, l'Initiative HPC-PME s'est ouverte aux centres universitaires de calcul, partenaires du projet Equip@meso (voir page 33), dans l'objectif d'étoffer ses relais locaux.

Pour accompagner les PME dans leur approche du calcul intensif, les compétences de chaque partenaire sont mobilisées en fonction des besoins exprimés : expertise technologique, formation, accès aux ressources de calcul, enjeux économiques et financiers.

Parmi les bénéficiaires de l'Initiative HPC-PME, l'une d'elles a participé à la PRACE Autumn School, co-organisée par le CEA et GENCI en octobre 2011 (voir page 27), afin de se former à la programmation hybride avancée.
Une année après son démarrage, l'initiative a séduit près d'une vingtaine de PME. Couvrant l'ensemble du territoire national, ces PME sont issues de domaines divers : automobile, industrie maritime et offshore, digital media, biotechnologies, microélectronique, aéronautique, para-pétrolier...
Chaque cas est particulier et nécessite un accompagnement personnalisé.

Au terme du dispositif mis en place par l'initiative, l'une de ces PME, le motoriste Danielson Engineering, s'est équipé d'une plateforme matérielle et logicielle pour faire du calcul 3D avancé (voir ci-contre). Plusieurs autres PME sont en passe de finaliser leurs projets dont la concrétisation est attendue durant le premier semestre 2012.

www.initiative-hpc-pme.org



Moteurs boostés



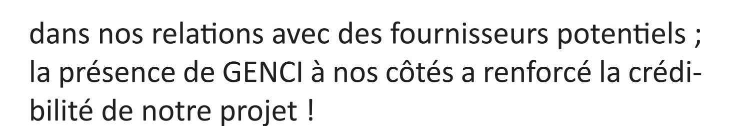
Danielson Engineering, premier succès de HPC-PME

Rui Da Silva Lourenço, responsable Calcul de la PME nivernaise spécialisée dans la conception et la fabrication de moteurs pour l'industrie automobile et aéronautique, revient sur les bénéfices du dispositif GENCI/Inria/Oseo.

Pourquoi avoir souhaité bénéficier de l'accompagnement proposé par l'Initiative HPC-PME ?
Clairement, c'était le bon moment ! Nous disposions déjà d'un service calcul assez développé mais les capacités de nos stations de travail ne nous permettaient pas d'envisager des modèles 3D de taille importante, qui sont de gros consommateurs de ressources de calcul.
Or, avec le calcul intensif, nous pouvions envisager des modèles 3D complets de moteur, ce qui nous permettait d'améliorer notre compétitivité et nos produits. Nous accédions ainsi à des thématiques comme la combustion dans les moteurs thermiques mais également à des algorithmes d'optimisation de forme et paramétrique.
Il nous fallait à la fois investir dans une plate-forme de calcul intensif et développer des solutions logicielles avancées.
L'offre de l'Initiative HPC-PME est donc arrivée, pour nous, à point nommé : sans elle, nous ne nous serions pas engagés aussi rapidement dans cette voie.

© DE

Vos attentes ont-elles été satisfaites ?
Elles l'ont été, à la fois sur le plan de l'expertise technique pour définir la solution à mettre en œuvre et d'un point de vue financier puisque nous avons bénéficié du soutien d'Oseo.
Grâce à cet accompagnement technique et financier, nous avons mené à bien notre projet, baptisé Advice (Advanced Design for Vehicles and Internal Combustion Engine) en 16 mois, depuis son montage avec HPC-PME jusqu'au démarrage récent de la nouvelle plateforme de calcul.
Je dois dire que le poids de GENCI a été déterminant dans nos relations avec des fournisseurs potentiels ; la présence de GENCI à nos côtés a renforcé la crédibilité de notre projet !



Quels résultats concrets avez-vous obtenu ?
Notre nouvelle plate-forme de calcul a effectué ses premiers « runs » en mars dernier [2012] et sera totalement opérationnelle dans les prochains mois. Les bénéfices techniques sont d'ores et déjà visibles puisque nous proposons trois nouvelles prestations de modélisation et d'optimisation : combustion des moteurs thermiques, aérodynamique interne instationnaire, conception mécanique optimale.
Nous avons deux études en cours et nous devons encore faire la preuve de notre nouvelle valeur ajoutée, auprès de clients potentiels.
Par ailleurs, nous avons déjà recruté trois personnes (deux ingénieurs calcul et un informaticien) et prévoyons une embauche supplémentaire avant fin 2012. Au total, ce sont six recrutements qui devraient être réalisés d'ici à la fin de l'année prochaine.
C'est un rythme plus élevé que prévu !

Quel regard portez-vous sur l'Initiative HPC-PME ?
C'est un regard positif puisque nous sommes allés « jusqu'au bout » de l'accompagnement mis en place par HPC-PME et que nous disposons désormais des équipements adéquats pour faire de la combustion 3D. Autre bénéfice : nous avons été propulsés sur le devant de la scène pour présenter notre plateforme de calcul et c'est évidemment déterminant pour se faire connaître !



Projet Equip@meso

Construire à l'échelle régionale

Coordonné par GENCI, Equip@meso vise à consolider le calcul intensif en région dans toutes ses composantes (formation, équipement, relais vers les industriels), en associant dix partenaires universitaires.

Pour les partenaires du projet Equip@meso, l'année 2011 a permis de mener à bien trois actions : définir et mettre en place les modalités de gouvernance du projet (comité de pilotage et comité d'orientation) ; lancer l'acquisition des calculateurs ; désigner un relais dans le cadre du déploiement en région de l'Initiative HPC-PME (voir page 30).

Dans le domaine de la **formation**, la Maison de la Simulation a organisé, du 20 juin au 8 juillet 2011 à Chamonix, en collaboration avec l'IDRIS et le CCRT, une école d'été de trois semaines, dédiée au calcul intensif. Plus de 80 participants se sont ainsi formés aux méthodes de programmation parallèle et à l'utilisation des GPU.

La Maison de la Simulation a également organisé, en collaboration avec le CERFACS et Inria, une formation sur l'algèbre linéaire creuse parallèle, qui a réuni une trentaine de participants à Bordeaux du 28 novembre au 2 décembre 2011. Une suite est prévue en mai 2012 et d'autres événements sont en préparation, notamment une journée Equip@meso programmée le 18 octobre 2012 à Strasbourg sur le thème « Chimie et sciences de la vie : de la simulation numérique au HPC ».

En ce qui concerne l'**acquisition d'équipements**, plusieurs partenaires ont entamé les démarches nécessaires (appel d'offre, dialogue compétitif ou utilisation d'un marché existant). Pour la plupart d'entre eux, la livraison du matériel interviendra au cours de l'année 2012 ; la mise en service ainsi que l'exploitation de l'équipement devant suivre rapidement.

L'initiative HPC-PME a commencé à se déployer auprès des centres partenaires. Trois d'entre eux (Toulouse, Grenoble et Rouen) ont été sollicités par HPC-PME pour prendre en charge une PME (expertise et réalisation de calculs). D'autres partenaires ont directement été approchés par des PME, échanges qui devraient déboucher en 2012.

En termes de **partenariats**, le projet Equip@meso a pris différents contacts. D'une part, sur la base de la décision du Premier Ministre demandant à Equip@meso d'élargir sa « couverture géographique aux projets suivants : nanotechnologie à Grenoble, aéronautique à Toulouse, matériaux à Nantes, communications à Rennes et systèmes à Saclay, en lien avec les pôles de compétitivité impliqués sur les sites et OSEO », GENCI a entamé en 2011 des discussions avec trois Instituts de recherche technologique (IRT) : AESE à Toulouse (aéronautique), NanoElec à Grenoble (nanotechnologie) et Jules Verne à Nantes (matériaux).
Des contacts ont également été pris pour ouvrir Equip@meso à d'autres partenaires universitaires.

Equip@meso fait partie des 52 projets retenus dans le cadre du premier appel à projets « Equipements d'excellence », dont les résultats ont été annoncés début 2011.
Doté de 10,5 millions d'euros sur 10 ans, Equip@meso est coordonné par GENCI et associe dix partenaires académiques et universitaires : le Centre de ressources informatiques de Haute-Normandie (CRIHAN), le PRES Université de Toulouse, l'Université d'Aix-Marseille I, l'Université Claude Bernard Lyon I, l'Université Joseph-Fourier Grenoble I, l'Université de Strasbourg, l'Université de Reims Champagne-Ardenne, le PRES Paris Sciences et Lettres (représenté par l'Observatoire de Paris et l'Ecole Normale Supérieure), l'Université Pierre et Marie Curie ainsi que la Maison de la simulation portée par le CEA (avec le concours du Cerfacs et du GDR Calcul du CNRS).
Equip@meso poursuit trois grands objectifs :

- Renforcer les capacités de calcul intensif des centres
- Relayer localement l'Initiative HPC-PME
- Offrir un service d'excellence et de proximité, en termes de formation, d'éducation ou de calcul, complémentaire des moyens nationaux grâce à une animation scientifique spécifique

Ciment local



Equip@meso : un bilan déjà positif pour Grenoble

Emmanuel Chaljub, responsable de CIMENT (Calcul intensif, modélisation, expérimentation numérique et technologique) à l'Université Joseph-Fourier à Grenoble, revient sur sa participation au projet Equip@meso.

Equip@Meso est un projet structurant pour la communauté scientifique grenobloise. Il joue un rôle de catalyseur pour la construction d'un environnement scientifique transversal autour de la modélisation et du calcul, ce qui est aussi l'objectif du mésocentre CIMENT et de la maison de la modélisation et de la simulation (MaiMoSiNE). Le projet va nous permettre de franchir un palier en construisant une plateforme de calcul dont la puissance représente plus du double de la puissance totale offerte par CIMENT, et dont le budget représente un peu plus de 5 ans d'investissement du mésocentre. Equip@meso, avec le changement d'échelle qu'il implique, est également moteur pour la mise en œuvre d'une infrastructure éco-responsable d'hébergement des moyens de calcul mutualisée au niveau de l'université grenobloise. Enfin, l'objectif de relayer localement l'initiative HPC-PME nous donne l'occasion de mieux structurer et animer la relation avec les PME/PMI, en coordonnant les actions des structures universitaires grenobloises qui travaillent à l'interface recherche-industrie dans le domaine de la modélisation et du calcul.

Equip@Meso renforce la dynamique régionale et nationale. Si le rôle des régions est essentiel pour le développement des mésocentres de calcul, le projet Equip@Meso accroît la dynamique régionale autour de la modélisation et du calcul intensif, qui existait déjà grâce au projet Calcul Intensif en Rhône-Alpes dans le cadre d'un financement du CPER 2006-2013. Les plateformes de calcul grenobloise et lyonnaise, acquises en 2012-2013, seront co-financées par la région et ouvertes en partie à l'ensemble de la communauté scientifique rhône-alpine. Cela devrait stimuler les échanges scientifiques au niveau régional et renforcer les actions d'animation scientifique et de formation portées par MaiMoSiNE à Grenoble et le Centre Blaise Pascal à Lyon. Equip@Meso permet également de renforcer les liens avec les mésocentres partenaires en favorisant les échanges d'expérience et expertise autour du calcul intensif, complétant ainsi le rôle des journées mésocentres organisées chaque année. Ce projet est également une très bonne opportunité de construire un lien fort avec les tiers supérieurs de la pyramide du calcul intensif : définition d'une stratégie commune, renforcement du rôle de tremplin des mésocentres etc.

Quand les partenaires d'Equip@meso (Emmanuel Chaljub au premier plan) découvrent le supercalculateur CURIE... © GENCI

Le bilan 2011 est déjà positif pour CIMENT et MaiMoSiNE. Les réflexions sur le problème de l'hébergement de la future plateforme de calcul et de la maîtrise de son empreinte environnementale ont abouti à la mise en œuvre d'une politique d'hébergement mutualisée à l'échelle du site universitaire. C'est une avancée importante.
Concernant HPC-PME, un premier contact a été établi avec une entreprise locale et les calculateurs du mésocentre ont permis d'établir une phase de diagnostic assez fructueuse. Ce travail préliminaire sert de base à une collaboration de plus long terme, avec notamment un stage de master (sur les outils de monitoring de performances des codes sous java) et un projet de consortium. La PME a, par ailleurs, le projet imminent d'acquisition d'un cluster de calcul, dont l'architecture sera définie en fonction des tests réalisés sur les machines de CIMENT.

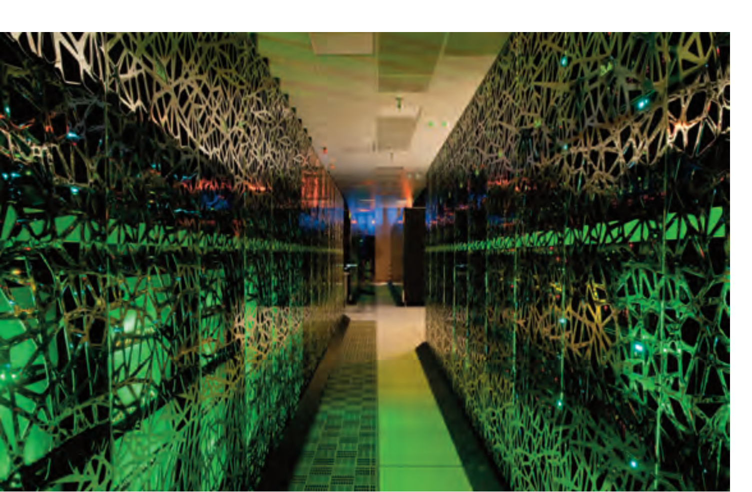
CURIE, année 1

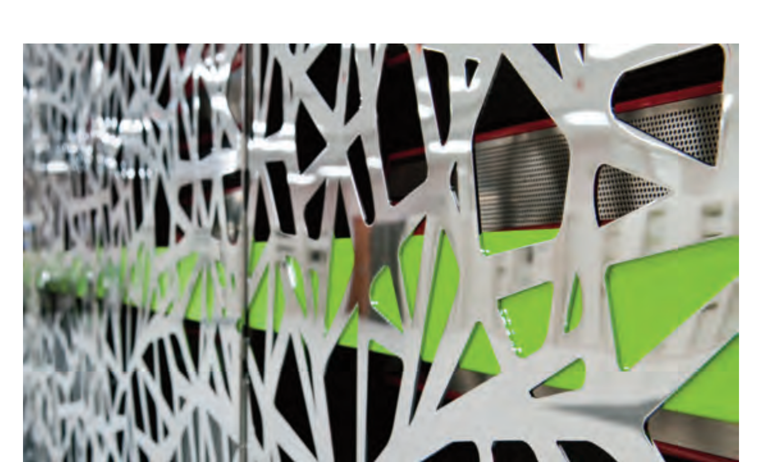
Conçu par Bull pour GENCI et mis à disposition de la communauté scientifique française et européenne, le supercalculateur CURIE est la deuxième composante de l'infrastructure européenne de calcul intensif PRACE (voir page 24).

Pour bénéficier des meilleures opportunités technologiques, CURIE a été installé en deux phases, entre fin 2010 et fin 2011, qui ont permis d'intégrer différents types de nœuds de calcul (larges, hybrides et fins).
Dès la première phase achevée, CURIE était ouvert aux scientifiques français et européens. Depuis le 1er mars 2012, il est accessible dans sa configuration complète.



CURIE se caractérise par une architecture équilibrée, unique en Europe : le calculateur a été conçu pour combiner une puissance de calcul élevée et une capacité très grande de traitement des données.
C'est un atout majeur pour relever les plus grands défis scientifiques dans des domaines comme la climatologie, les sciences de la vie (voir page 2) et l'astrophysique. Dans ces disciplines, la complexité des problèmes abordés (la structuration de l'Univers, par exemple) et les échelles de temps (l'Univers, du Big Bang à nos jours) ou de taille (la structure d'une protéine) nécessitent non seulement une grande puissance de calcul pour être traités mais également un traitement performant des données qui sont générées.







Le supercalculateur CURIE conçu par Bull pour GENCI.

CURIE est exploité par les équipes opérationnelles du Très Grand Centre de calcul du CEA (TGCC) à Bruyères-le-Châtel, où il bénéficie d'un environnement scientifique et technique de pointe.

Avec l'investissement réalisé par GENCI, d'un montant de 100 millions d'euros sur cinq ans, CURIE permet à la France de tenir ses engagements auprès de l'infrastructure européenne de calcul intensif PRACE, dont elle est un des membres fondateurs.

Avec sa puissance de calcul, CURIE serait **capable de lire deux milliards de livres en une seule seconde**.

Il peut stocker jusqu'à l'**équivalent de 7600 ans de fichiers MP3**, à une **vitesse 100 000 fois supérieure à celle d'une connexion ADSL à très haut débit**.

CURIE, ce sont au total **120 racks sur 200m²**, comportant **plus de 92 000 cœurs de calcul** et **50** kilomètres de câbles.

CURIE consomme globalement **3.5 MW**, soit autant que la commune voisine d'Arpajon (9000 habitants).

Photos de CURIE



5 ASSOCIÉS, ACTEURS MAJEURS DE LA RECHERCHE FONDAMENTALE ET TECHNOLOGIQUE EN FRANCE

GENCI est une société civile, créée en 2007 et détenue à 49 % par l'Etat, représenté par le **Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche**, 20 % par le **CEA**, 20 % par le **CNRS**, 10 % par les Universités qui sont représentées par la **Conférence des Présidents d'Université (CPU)** et 1 % par **Inria**.

UNE DYNAMIQUE COLLECTIVE AU SERVICE DE :

- **l'équipement des trois centres nationaux de calcul,** avec près d'un petaflop/s à dispostion de la communauté scientifique française début 2012, soit un accroissement d'un facteur 50 en cinq ans sur des architectures variées et complémentaires
- **la construction d'un écosystème européen du calcul intensif,** au niveau européen en représentant la France dans l'initiative PRACE, au niveau national en coordonnant la politique française dans le domaine du calcul intensif et au niveau régional avec le projet Equip@meso
- **la promotion de la simulation numérique et du calcul intensif** auprès du monde de la recherche académique, auprès des industriels, avec Inria et Oséo dans une initiative spécifique à destination des PME

GOUVERNANCE

La gouvernance de GENCI est organisée autour d'un conseil et de différences instances techniques.
Le **Conseil** remplit le rôle d'une Assemblée Générale. Il représente la collectivité des associés où les décisions majeures sont prises (budget, orientations stratégiques). Le Conseil s'est réuni quatre fois en 2011.
Pour mener à bien ses missions, le Conseil s'appuie sur l'expertise des instances suivantes :
∗ le **Comité Consultatif Administratif et Financier (CCAF),** composé de représentants des associés, sur toutes les questions financières et administratives ;
∗ la **Commission des marchés**, obligatoirement consultée lors des procédures de mise en concurrence en raison du caractère public des financements de GENCI ;
∗ le **Groupe Technique**, composé de représentants des associés, sur les questions techniques.

Composition du Conseil de GENCI au 31 décembre 2011

Président du Conseil : Catherine RIVIERE, PDG de GENCI

Représentant l'État : Robert PLANA, directeur scientifique et chef du Service de la stratégie en recherche et innovation au Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche (MESR/DGRI), et Bernard CARRIERE, conseiller au Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche (MESR/DGESIP). **Représentant le CEA :** Jean-Paul DURAUD, directeur adjoint des Sciences de la matière (CEA/DSM), et Christophe BEHAR, directeur de l'Énergie nucléaire (CEA/DEN). **Représentant le CNRS :** Philippe BAPTISTE, directeur de l'Institut national des sciences informatiques et de leurs interactions (CNRS/INS2I), et Jean-François STEPHAN, directeur de l'Institut national des sciences de l'Univers (CNRS/INSU). **Représentant les Universités :** Daniel EGRET, directeur de l'Observatoire de Paris, et Guy COUARRAZE, président de l'Université Paris XI. **Représentant invité du Ministère de l'Industrie :** Franck TARRIER, chef du bureau Logiciel à la Direction Générale de la Compétitivité, de l'Industrie et des Services (DGCIS) **Représentant Inria :** Antoine PETIT, directeur général adjoint, et Bruno SPORTISSE, directeur du Transfert et de l'Innovation. **Au titre du contrôle économique et financier de l'État :** Jean-Claude PERREL, contrôleur d'État.

Composition du Comité consultatif administratif et financier de GENCI au 31 décembre 2011

Représentant l'État : Sylvie AMBLARD, chargée d'études au département de la gestion et du pilotage budgétaires des programmes à la DGRI (MESR/DGRI). **Représentant le CEA :** Patrick GUYARD, directeur financier adjoint. **Représentant le CNRS :** Isabelle ALECI, chef du Pôle d'appui financier à la science. **Représentant les Universités :** Michel DELLACASAGRANDE, ancien directeur financier de l'Education nationale.



Composition de la Commission des marchés de GENCI au 31 décembre 2011

Représentant l'État : Philippe AJUELOS, chef de la mission des achats du Ministère de l'Education Nationale, et Sylvie AMBLARD, chargée d'études au département de la gestion et du pilotage budgétaires des programmes à la DGRI (MESR/DGRI). **Représentant le CEA :** Laurence GASSE, service commercial du CEA/Saclay et Thibault PELLETIER, Direction des Achats et Partenariat Stratégique du CEA. **Représentant le CNRS :** Jean-Eudes FOUMENTEZE, chef de bureau de la règlementation à la DAJ du CNRS et Vincent GOUJON, directeur de l'UPS 2295 achats et coordination des achats du CNRS. **Représentant les Universités :** Michel DELLACASAGRANDE, ancien directeur financier de l'Education nationale et Yves LE RAY, Directeur administratif et financier de SOLEIL et président de la commission des marchés pour deux ans.

Composition du Groupe technique de GENCI au 31 décembre 2011

Représentant l'État : Laurent DESBAT, conseiller au Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche. **Représentant le CEA :** Laurent CROUZET, assistant du directeur des Sciences de la matière - en charge du calcul intensif et de l'informatique (CEA/DSM), et Jacques DAVID, coordinateur PRACE/GENCI/HPC pour la Direction de l'énergie nucléaire (CEA/DEN). **Représentant le CNRS :** Michel DAYDÉ, délégué scientifique de l'Institut national des sciences informatiques et de leurs interactions (CNRS/INS2I) en charge des grilles de calcul et du HPC, et Serge FAYOLLE, directeur de l'IDRIS. **Représentant les Universités :** Francis DAUMAS, directeur du CINES. **Représentant Inria :** Thierry PRIOL, directeur scientifique adjoint auprès de la direction de la recherche et de la direction des partenariats européens - en charge du domaine « Réseaux, systèmes et services, calcul distribué », et Jean ROMAN, directeur scientifique adjoint auprès de la Direction de la recherche en charge du domaine « Mathématiques appliquées, calcul et simulation ».

ÉQUIPE

Sous la conduite de Catherine Rivière, GENCI dispose d'une équipe de neuf personnes.

Catherine RIVIÈRE PDG	**Alain LICHNEWSKY** Responsable scientifique	**Stéphane REQUENA** Responsable technique
Laetitia BAUDIN Responsable communication	**Edouard BRUNEL** Secrétaire général	**Catherine LE LOUARN** Responsable des opérations
Virginie MAHDI puis Pascal MOUSSIER Responsable projets	**Maïté CAMPEAS** **Assistante**	**Arnaud DELIMOGES** Suivi administratif et financier des projets européens

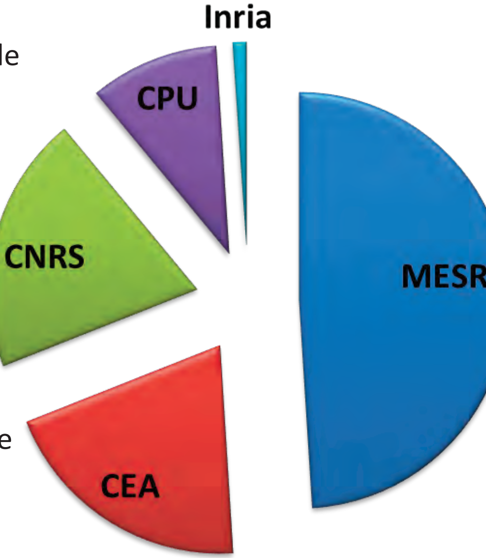
CHIFFRES CLÉS

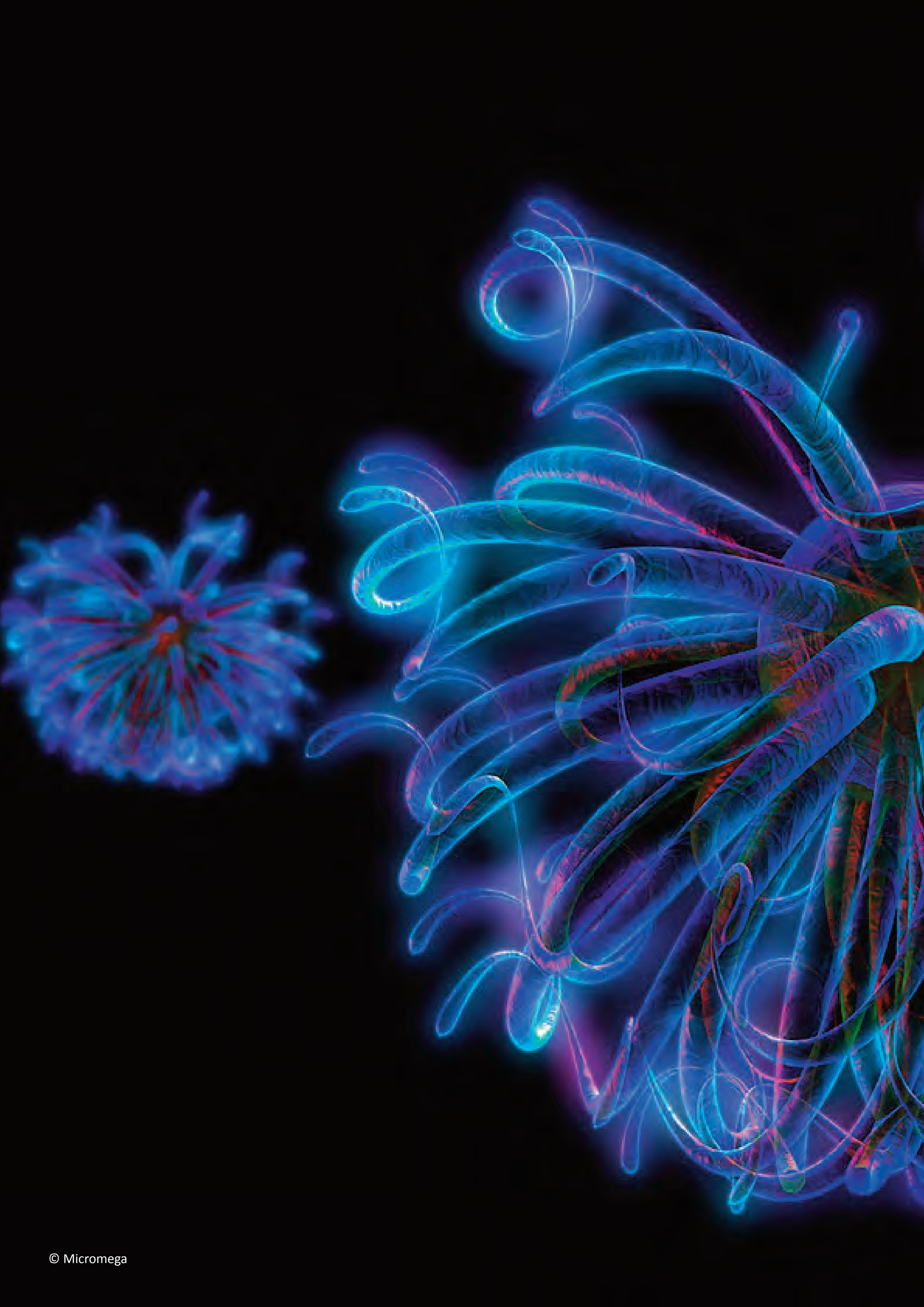
Le financement de GENCI est principalement assuré par la contribution de ses membres, à hauteur de leur participation dans la société civile.

A cette contribution, s'ajoutent des allocations de budget attribuées à GENCI au titre de son implication dans différents projets européens dont PRACE.

Pour l'année 2011, le budget de GENCI s'est élevé à 30 millions d'euros (voir répartition ci-contre).

L'installation puis l'exploitation du supercalculateur CURIE est la principale dépense en 2011.





Le bilan scientifique



Sommaire



Réunion du comité d'évaluation, dans les locaux de GENCI, le 2 décembre 2011.

Photos © GENCI

De gauche à droite : Luc Vervisch, Yves Ellinger et Yves-Henri Sanejouand.

Le calcul intensif est un indicateur du haut degré technologique d'un État

Spécialiste de science computationnelle, membre de l'Académie des sciences, Olivier Pironneau préside le comité d'évaluation de GENCI. Il est également président du Comité stratégique du calcul intensif (CSCI), qui est chargé de conduire des études et des réflexions ainsi que de formuler des propositions sur l'organisation et le renouvellement des équipements de calcul intensif en France.



Quel bilan global tirez-vous de l'année écoulée ?

Dans l'ensemble et comme les années précédentes, le processus d'attribution des heures de calcul sur les moyens nationaux a bien fonctionné en 2011 même si on constate une certaine saturation des machines.

Parmi les disciplines en pointe l'année dernière, on peut citer l'astrophysique ainsi que la climatologie et la météorologie qui ont pris toute la mesure de l'intérêt du calcul intensif.

Dans d'autres domaines, en revanche, la diffusion du calcul intensif reste plus lente ; je pense notamment à des disciplines comme la chimie et la géologie où le calcul intensif ne concerne toujours qu'une minorité de chercheurs.

Autre sujet de préoccupation, la formation : les scientifiques capables de faire de la simulation numérique par le calcul intensif sont encore trop peu nombreux et les supercalculateurs restent des « bêtes » difficiles à programmer, donc à utiliser. Des efforts ont été entrepris pour mettre en œuvre des formations dans le domaine de la simulation numérique et du calcul intensif, mais ils ne seront payants qu'à long terme.

Plus globalement, l'année 2011 a été marquée par l'émergence de la question du « Big Data ».

Il ne suffit pas de disposer de moyens de calcul puissants, il faut également stocker et traiter efficacement les données générées, dans des temps compatibles avec ceux des projets de recherche.

Quelles sont, selon vous, les perspectives d'évolution de l'usage du calcul intensif en France ?

C'est dans le domaine industriel que l'usage du calcul intensif doit se développer. Qu'il s'agisse de biotechnologies, de nouveaux matériaux ou d'industries de pointe comme l'aéronautique. Aujourd'hui, hormis certains grands groupes comme Total, le calcul intensif demeure encore trop peu répandu, notamment dans les PME. A cet égard, les premiers résultats de l'initiative HPC-PME, portée par GENCI, Inria et Oséo, sont très positifs et doivent être encouragés.

Par ailleurs, le développement du calcul intensif dans la sphère académique permet d'espérer des avancées majeures sur un certain nombre de sujets déterminants pour l'avenir de notre société : le climat, la gestion des ressources, la compréhension de l'économie et des systèmes financiers…

Enfin, le calcul intensif est et doit rester le fer de lance de l'industrie informatique en général. Ainsi, ce sont les besoins exprimés par les numériciens qui ont conduit au développement des supercalculateurs hybrides, beaucoup plus rapides que leurs « grands frères » à base de processeurs classiques.
Outre l'architecture des machines, on peut aussi espérer des progrès dans le domaine de la consommation d'énergie.
C'est ce qui se passe dans l'industrie automobile, par exemple, où les nouveaux concepts (motorisation, sécurité etc.) sont d'abord développés et testés sur les Formule 1 avant d'être mis en œuvre pour l'automobile « grand public ».

Alors que la compétition internationale s'intensifie (Chine, Japon, Etats-Unis, Russie etc.), quels sont les atouts de la France ?

Plus que s'intensifier, je dirais plutôt que la compétition internationale se diversifie ! Le Japon s'est récemment relancé dans la course mondiale avec son supercalculateur baptisé K computer, la Russie a atteint le petaflop/s par ses propres moyens… Quant à la Chine, elle produit désormais ses propres processeurs et va en équiper ses supercalculateurs.

Une des réponses à cette nouvelle situation c'est de parier sur le co-design pour imaginer les supercalculateurs de demain, qui devront être adaptés à la fois aux besoins des utilisateurs et aux technologies existantes. Cela veut dire faire travailler ensemble utilisateurs académiques et industriels, experts du calcul intensif et spécialistes de la programmation numérique. C'est, par exemple, le cas de l'ECR Lab dont GENCI est partenaire aux côtés du CEA, d'Intel et de l'Université Versailles Saint-Quentin en Yvelines.
En France, nous avons justement des atouts. Nous restons en pointe dans le domaine de la formation théorique (algorithmes) dont le niveau est beaucoup plus élevé qu'ailleurs, notamment aux Etats-Unis.

L'autre grande force de la France ce sont ses moyens de calcul : grâce aux investissements réalisés par GENCI depuis 2007, nos équipes de recherche peuvent aujourd'hui rester à la hauteur de la compétition internationale. Le calcul intensif est un indicateur du haut degré technologique d'un Etat. Avec la mise en production du supercalculateur CURIE dans le cadre de l'infrastructure européenne de calcul intensif de PRACE, nous venons de faire un nouveau bond en avant. Cet investissement important permet à la France de donner accès à des moyens de calcul très puissants. Du coup, un certain nombre d'équipes de recherche peuvent participer à la compétition scientifique internationale avec les mêmes armes que leurs homologues dans le monde.
C'est fondamental !

Quelle articulation justement voyez-vous entre moyens nationaux et moyens européens ? Et, plus globalement, quelles sont, pour vous, les perspectives à l'échelle européenne ?

Je tiens d'abord à souligner que le bilan de la participation française dans PRACE, en nombre de projets retenus sur les moyens de calcul de l'infrastructure, est positif et c'est une très bonne nouvelle. Mais PRACE n'est pas un « guichet » ouvert en continu et pour tous : l'accès à ses ressources de calcul privilégie clairement des études de pointe dont on espère un fort retentissement international.

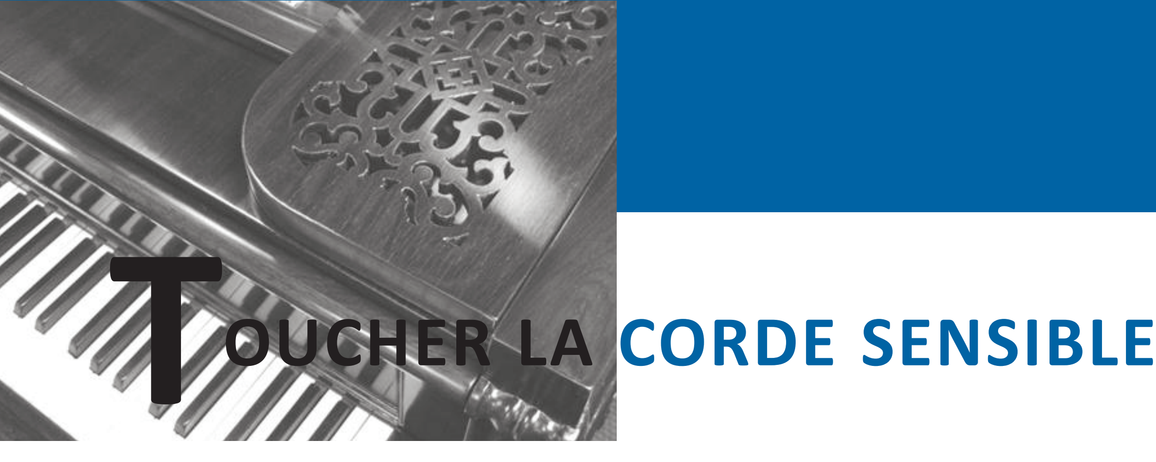
Nous devons donc poursuivre la construction de l'écosystème du calcul intensif en consolidant chaque niveau - européen, national et régional - de telle façon que chacun accède aux « bons » moyens de calcul.
En France, les initiatives portées par GENCI, notamment le projet Equip@meso pour développer les moyens des centres universitaires, y contribuent très largement.
Nous sommes sur la bonne voie !

Les dix comités thématiques de GENCI

CT1 : Environnement
CT2 : mécanique des fluides, fluides réactifs, fluides complexes
CT3 : Simulation biomédicale et applications à la santé
CT4 : Astrophysique et géophysique
CT5 : Physique théorique et physique des plasmas
CT6 : Informatique, algorithmique et mathématiques
CT7 : Systèmes moléculaires organisés et biologie
CT8 : Chimie quantique et modélisation moléculaire
CT9 : Physique, chimie et propriétés des matériaux
CT10 : applications transverses et nouvelles application du calcul intensif

Avancées scientifiques 2011

Les résultats mis en lumière dans les pages qui suivent ont été obtenus durant l'année 2011 sur les moyens nationaux de GENCI. Ils sont le fruit de travaux conduits, dans la durée, par des équipes souvent interdisciplinaires et internationales mais ne constituent qu'une partie des réalisations 2011.
Une autre sélection de résultats est présentée sur le site de GENCI : www.genci.fr



TOUCHER LA CORDE SENSIBLE

Contrairement aux apparences, le piano est un système acoustique et mécanique sophistiqué dont la facture demeure à ce jour très largement empirique. Les connaissances, très précises, des concepteurs et fabricants de pianos sont issues de siècles d'expérimentations, d'échecs, de succès... Et intriguent beaucoup les chercheurs en acoustique musicale. En utilisant des méthodes scientifiques pour modéliser le fonctionnement d'un piano et de ses différents éléments, il est possible de confirmer ou non ces connaissances et d'aller plus loin dans la compréhension des phénomènes mis en jeu.

Chacune des étapes acoustiques intervenant lors de l'exécution d'une note (voir encadré) peut être modélisée par une équation particulière. C'est le travail qui a été mené par Juliette Chabassier, d'Inria : elle a établi et discrétisé (découpé en tout petits intervalles de temps et d'espace) un modèle général puis calculé numériquement les solutions grâce à des méthodes spécialement développées. « Ce travail s'inscrit dans le cadre de mon doctorat en mathématiques appliquées co-encadré par Patrick Joly, directeur du projet INRIA POEMS et spécialiste de modélisation et analyse numérique pour la propagation des ondes, et Antoine Chaigne, directeur de l'Unité de Mécanique de l'ENSTA et spécialiste d'acoustique musicale », précise-t-elle. Grâce à ce modèle et aux simulations numériques qui en découlent, la jeune scientifique est parvenue à reproduire fidèlement des formes expérimentales, mais aussi, par exemple, à connaître le champ de pression de l'air sur un ensemble de points tout autour du piano, impossible à mesurer dans la réalité sans perturber le système.

De façon schématique, lorsqu'une touche du clavier est jouée, un mécanisme très précis démultiplie son mouvement et actionne un marteau qui frappe entre une et trois cordes à la fois (selon la note choisie). Les cordes se mettent alors en vibration et c'est le chevalet qui transmet l'énergie des cordes à la table d'harmonie, qui vibre elle aussi, mettant en mouvement les molécules d'air avoisinantes, et entrainant la propagation d'un son dans l'air.

« L'une des applications de ce modèle et de sa discrétisation numérique est bien sûr l'aide à la facture instrumentale pour valider le savoir millénaire et empirique des concepteurs et fabricants de pianos mais aussi approfondir notre compréhension des phénomènes physiques mis en jeu », explique Juliette Chabassier. Cette simulation de piano, réalisée sur les calculateurs TITANE et JADE de GENCI, permet d'isoler certains phénomènes afin de comprendre leur influence sur le son, sur le rayonnement ou encore sur la transmission de l'énergie... Mais aussi de construire virtuellement des pianos qui n'existent pas (en changeant la forme ou la taille de la table, les matériaux utilisés...) et d'écouter le son qu'ils produiraient s'ils étaient réellement construits. Voire de générer des sons d'objets qui ne peuvent pas exister pour des raisons pratiques (matériaux inventés, cordes de sept mètres de long, piano flottant sans cadre ni pieds...) mais qui respectent les lois de la physique et dont le son paraît plausible à l'oreille.

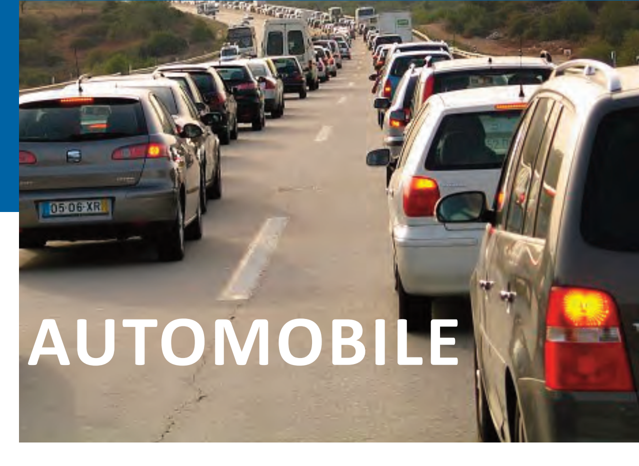
6 4 2 0 -2 -4 -6

© Inria

Un véritable challenge scientifique impossible à relever sans moyens de calculs à la hauteur.

Modélisation et simulation numérique du piano par modèles physiques
Inria
Responsable projet : J. Chabassier
Moyens GENCI : TITANE (CEA/CCRT) et JADE (CINES)

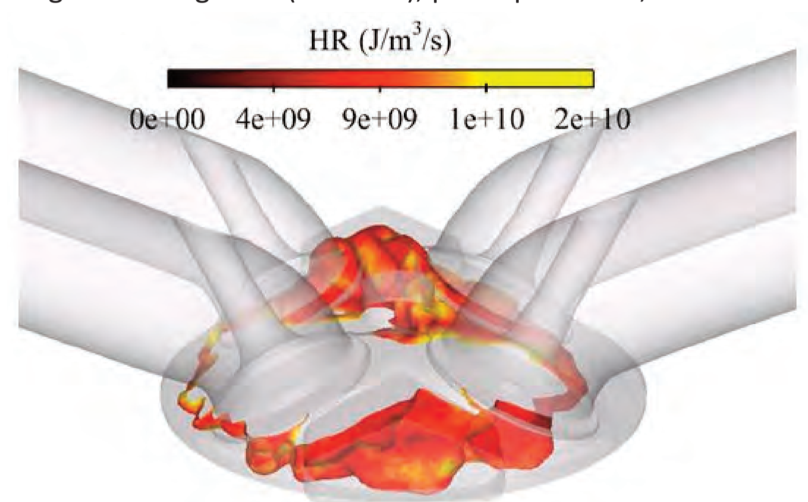
Projet de recherche issu du **comité thématique « Informatique, algorithmique et mathématiques » (CT6).** Photo © Emeraldnabi - Creative Commons



RÉDUIRE LA POLLUTION AUTOMOBILE

La réduction de la consommation et des émissions automobiles est un enjeu sociétal majeur. Pour y répondre, IFP Énergies Nouvelles (IFPEN) cherche à mieux comprendre et maîtriser le fonctionnement, d'un cycle à l'autre, d'un moteur 4 temps essence, qui s'avère instable dans certaines conditions. Le cycle 4 temps, utilisé en particulier dans les moteurs automobiles, permet la transformation de l'énergie chimique contenue dans le carburant en énergie mécanique. Or, les variabilités cycliques constatées freinent le développement de nouveaux concepts comme les moteurs dits « downsizés » (de moindre cylindrée), qui permettent d'obtenir des gains en consommation et en émissions de CO_2 et autres polluants.

Le projet de recherche européen «Large-Eddy & System Simulation to predict Cyclic Combustion Variability in gasoline engines» (LESSCCV), piloté par IFPEN, vise à améliorer la compréhension et la modélisation des variations cycliques dans les principaux types de moteurs à allumage commandé. L'objectif est de limiter les impacts négatifs de ces phénomènes sur la consommation et les émissions polluantes des véhicules.



Visualisation 3D de la flamme après allumage © IFPEN

Dans certaines conditions, la combustion dans un moteur essence varie, en effet, d'un cycle à un autre. Cela rend difficile le contrôle optimal de chaque cycle et peut mener à une dégradation notable de la consommation d'essence et des émissions polluantes.

« Nous avons réalisé nos calculs sur la machine JADE du CINES avec une technique de simulation innovante, appelée Large-Eddy Simulation (LES ou simulation aux grandes échelles), pour étudier les causes et effets de ces variations cycliques. Ce n'est pas possible avec les techniques de simulation actuellement utilisées dans l'industrie », souligne Christian Angelberger, responsable du projet.

Des calculs LES de différentes conditions opératoires d'un moteur 4 temps ont ainsi permis de mieux comprendre les raisons des variations cycliques, et de proposer des modèles simples qui permettront d'améliorer le contrôle, cycle à cycle, d'un moteur 4 temps, y compris en présence de fortes variations et d'en limiter les impacts négatifs.

Simulation des instabilités de combustion dans un moteur à combustion interne
Engine CFD and System Simulation Dept - IFP Energies Nouvelles (IFPEN)
Equipe : K. Trufin, C. Pera, S. Richard, O. Colin, C. Angelberger
Moyens GENCI : JADE (CINES)

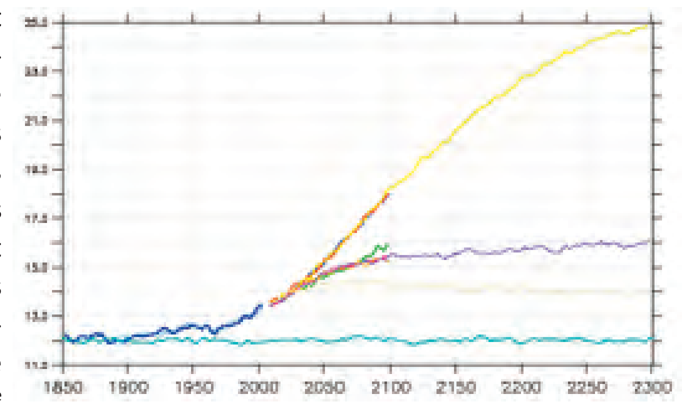
Projet de recherche issu du **comité thématique « Mécanique des fluides, fluides réactifs, fluides complexes » (CT2).** Photo © Osvaldo Gago - Creative Commons



PRÉVOIR L'ÉVOLUTION DU CLIMAT

Prévoir l'évolution future du climat et répondre aux questions posées à la société sur le réchauffement climatique suite à l'augmentation des gaz à effet de serre est un défi pour toute la planète. Le travail sur la modélisation de l'évolution climatique est structuré internationalement par le Groupe d'experts Intergouvernemental sur l'Evolution du Climat (GIEC) dont le 5e rapport d'étape (AR5) doit être publié en septembre 2013 après une série de congrès internationaux et de publications des résultats intermédiaires. Les équipes françaises mènent, depuis plus de trois ans, des travaux coordonnés dans le cadre du projet CMIP5 piloté par le WGCM (Working Group on Coupled Models) du Programme Mondial de Recherche sur le Climat, en vue de contribuer à haut niveau à cet effort exceptionnel et international de modélisation.

Les travaux des équipes françaises ont été notamment effectués avec la toute nouvelle version du modèle de climat IPSL-CM5A-LR pour réaliser des simulations CMIP5 de périodes dites « historiques » (1850-2005) et de « scénarios futurs » (2005-2300). Le modèle IPSL-CM5A-LR simule toutes les composantes du système Terre (ESM, Earth System Model) : il inclut l'atmosphère, les océans, la cryosphère, la végétation continentale et va jusqu'au couplage entre le climat et le cycle du carbone, avec une résolution suffisamment basse pour que de nombreuses simulations puissent être réalisées dans un temps assez court. La courbe ci-contre montre l'évolution temporelle de la température moyenne de l'air près de la surface (T 2m, °C) pour un sous-ensemble des simulations climatiques CMIP5 : une simulation de contrôle de 1000 ans (en bleu azur), un ensemble de simulations « historiques » et de « scénarios futurs » (en couleurs). On peut remarquer la très bonne stabilité de la simulation de contrôle, dont la température ne dérive pas. L'accroissement de température en réponse aux forçages anthropiques est manifeste dès le milieu du XXème siècle. Le travail des participants français au projet CMIP5 couvre plusieurs grandes familles d'expériences :



- une simulation de contrôle de 1000 ans destinée à vérifier la calibration du modèle ;
- des prévisions décennales (rétrospectives et projections), initialisées par des états océaniques en phase avec les observations ;
- des références pour l'évaluation des modèles et la compréhension des climats de la période historique (1850-2005) et des paléoclimats ;
- des projections du climat futur (2005-2100 ou 2300) forcées par les concentrations des scénarios RCP du GIEC ;
- des simulations intégrant le cycle du carbone (couplage climat/carbone) forcées en émissions de CO_2 pour la période historique et les scénarios futurs RCP ;
- des simulations spécifiques permettant une meilleure compréhension des simulations à longs termes, ou permettant des études de détection et d'attribution du changement climatique.

Les résultats de ces simulations sont ensuite post-traités puis mis à la disposition de la communauté internationale dans une archive informatique distribuée. Ils constituent une partie essentielle de la contribution française aux travaux mondiaux du GIEC (AR5).

Simulations climatiques CMIP5 en vue de la préparation du 5ème rapport du GIEC
Institut Pierre-Simon Laplace
Equipes IPSL (LSCE, LMD) : J.-L. Dufresne, J.-Y. Granpeix, M. Kageyama, L. Li, O. Marti
Moyens GENCI : MERCURE (CEA/CCRT), CURIE (CEA/TGCC), TITANE (CEA/CCRT) et VARGAS (CNRS/IDRIS)
Projet de Recherche issu du **comité thématique « Environnement » (CT1).** Photo © The Economist (The Melting North) 2012



GUÉRIR LES AFFECTIONS GRAVES

Limiter le nombre d'administration d'anti-tumoraux et d'antiviraux à un patient atteint d'une affection grave est un défi majeur à relever. Cette problématique de santé publique bénéficie des progrès réalisés dans la découverte de nouveaux matériaux poreux, capables de confiner certaines de ces molécules actives. Ces matériaux, dits de type MOFs (Metal Organic Frameworks) et qui sont formés par l'association d'entités organiques et minérales biocompatibles, présentent des capacités d'encapsulation exceptionnelles pour certaines molécules anti-tumorales et antivirales couplées à des cinétiques de libération relativement lentes en milieu physiologique. Ce sont des candidats extrêmement prometteurs pour le transport de ces molécules vers les cellules attaquées par la maladie.

Les sujets de recherche de l'équipe « Dynamique & Adsorption dans les Matériaux Poreux » se situent à l'interface de la physique, de la chimie et de la biologie. Ils sont consacrés à la compréhension des mécanismes élémentaires qui gouvernent à la fois l'adsorption et la dynamique de molécules confinées dans des matériaux poreux de type MOFs (Metal Organic Frameworks).

« Dans le domaine médical, nos efforts de modélisation sont notamment concentrés sur les interactions entre molécules biologiques et MOFs pour déterminer les matériaux les mieux adaptés pour l'encapsulation et la libération contrôlée d'une série de molécules pharmaceutiques actives contre différentes formes de cancer et contre le sida », explique Guillaume Maurin, responsable du projet. Avec cet objectif, l'équipe de recherche a mis en œuvre différentes techniques de modélisation à l'échelle microscopique (classique et quantique), couplées à des outils novateurs de traitement statistique.
« Ces simulations sont systématiquement confrontées à des données expérimentales, issues de tests biologiques menés sur les matériaux prédits, sur lesquels les efforts de synthèse de nos collaborateurs de l'Institut Lavoisier de Versailles sont alors concentrés », précise-t-il.

© ICG

Les chercheurs ont ainsi montré, par calculs quantiques, que le MIL-53(Fe), un MOF à base de carboxylate de fer, fonctionnalisé avec des groupements amino, présente des énergies d'interaction fortes avec le Busulfan, une molécule anti-tumorale, lorsqu'elle est encapsulée dans ses pores.
Ce résultat permet d'espérer que la molécule encapsulée dans ce MOF se libère lentement dans l'organisme du patient, ce qui permettrait de limiter le nombre d'administration.

Mécanismes d'adsorption et dynamique de molécules confinées dans des matériaux poreux
Institut Charles Gerhardt (UMR5253, CNRS, Montpellier)
Responsable projet : G. Maurin
Moyens GENCI : JADE (CINES)

Projet de recherche issu du **comité thématique « Physique, chimie et propriétés des matériaux » (CT9).** Photo © planète-libertés



CHOQUER LES MATÉRIAUX

Passer une poêle chaude sous l'eau froide et c'est l'assurance d'un choc thermique. Hormis une grosse fumée et l'impression d'avoir fait une bêtise, quelles sont les conséquences d'un tel choc sur les matériaux ? C'est à ce genre de question que se propose de répondre la mécanique de la rupture, en simulant les microfissures qui apparaissent dans les matériaux. Pour une simple poêle, cela finit par un saut au supermarché du coin, mais pour une enceinte de centrale nucléaire, il est évident que les enjeux industriels et sociétaux sont autrement plus importants. Profitant d'une puissance de calcul inédite, Corrado Maurini (UPMC) et son collègue Blaise Bourdin (Louisiana State University) ont pu tester une approche originale.

L'apparition de microfissures dans un matériau est, en général, si difficile à prédire que les études traditionnelles se bornent à supposer l'existence d'une première microfissure avant d'étudier sa propagation éventuelle. Bien que suffisamment complexe en soi, ce problème ne permet pas une compréhension globale du phénomène. Corrado Maurini et Blaise Bourdin se proposent de ne plus supposer aucune microfissure originelle. Leur but est de simuler l'apparition puis l'évolution d'une fissure dans un matériau intact soumis à un choc thermique. Pour cela, ils disposent d'un arsenal mathématique (approche variationnelle, minimisation de fonctionnelle) et numérique (solveurs spécifiques, codes hautement parallélisés) bien rôdé.
Problème : étant donné qu'il est difficile de prévoir le lieu et le moment d'apparition de la fissure, et qu'il est important de bien la décrire, il faut disposer d'une simulation très précise en tout point du matériau. En termes techniques, le maillage en éléments finis doit être très fin tout en étant uniforme.

« En deux dimensions, je peux encore faire tourner mes modèles sur le cluster de mon laboratoire, mais en trois dimensions, c'est impossible. Il faut résoudre des équations avec des dizaines de millions de degrés de liberté » commente Corrado Maurini. Sur des machines telles que BABEL, il est désormais possible d'obtenir le type de simulations ci-contre, où les « trous » représentent la matière non endommagée. Soumis à un choc thermique à sa surface inférieure, le matériau se voit rapidement parcouru d'un réseau complexe de fissures.

© UPMC

Cette démarche est un pas supplémentaire vers la compréhension d'une famille de phénomènes complexes de comportement des matériaux. Une comparaison avec des résultats expérimentaux est en projet.

Simulation numérique de la multi-fissuration sous chargement thermique par l'approche variationnelle de la rupture fragile
Institut Jean Le Rond d'Alembert (UMR7190, Université Pierre et Marie Curie et CNRS)
Responsable projet : C. Maurini
Moyens GENCI : BABEL (CNRS/IDRIS)

Projet de recherche issu du **comité thématique « Nouvelles applications et applications transverses du calcul intensif » (CT10).** Photo © Pyb - Creative Commons

AUX ORIGINES DU MONDE

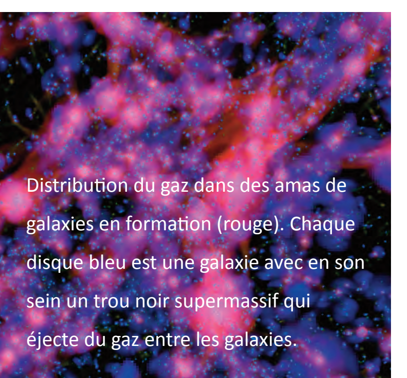




ÉCRIRE L'HISTOIRE DE L'UNIVERS

Le budget énergétique de l'univers est à peu près réparti de la sorte : 75 % de l'énergie totale est d'une nature inconnue - on l'appelle l'énergie noire, 20 % provient d'une matière inconnue appelée matière noire, 4 % provient de la matière ordinaire mais encore non observable et seul un petit 1 % provient d'une matière bien connue et observée. L'astrophysique s'aide de la simulation numérique intensive pour lever le voile sur ces pans encore sombres de notre science moderne : où est cachée la matière ordinaire manquante ? Quelle est la distribution de matière noire dans l'univers ? Quelle est la nature de l'énergie noire ?

Le **projet BINGO!** s'attaque aux 4 % de matière ordinaire encore non observée. Cette matière est située dans le milieu intergalactique, c'est-à-dire entre les galaxies. BINGO! simule ce milieu méconnu pour préparer les futures missions observationnelles qui braqueront leurs instruments dessus (sondes, télescope spatial). A cette fin, il faut partir d'un état connu très ancien de l'univers (le fond cosmologique, émis 400 000 ans après le Big Bang), intégrer les lois physiques dominantes (la gravité, l'hydrodynamique et la formation d'étoiles) et laisser le système évoluer pour former un univers peuplé de galaxies connectées par un réseau de filaments difficilement observable mais contenant une grande quantité de gaz. BINGO! est l'un des premiers projets à avoir réussi à simuler à haute résolution un phénomène complexe et important : l'éjection de gaz depuis les trous noirs supermassifs vers le milieu intergalactique (entre les galaxies). L'univers simulé doit être suffisamment détaillé pour bien étudier la formation des galaxies (résolution de quelques milliers d'années-lumière) et suffisamment grand pour obtenir des statistiques pertinentes (taille de plusieurs centaines de millions d'années-lumière). Ces deux contraintes rendent nécessaires l'utilisation du calcul intensif puisqu'il faut calculer l'évolution de plus d'un milliard de cellules de gaz et d'étoiles.



Distribution du gaz dans des amas de galaxies en formation (rouge). Chaque disque bleu est une galaxie avec en son sein un trou noir supermassif qui éjecte du gaz entre les galaxies.

Le **projet DEUS** s'attaque lui aux 75 % d'énergie noire. Cette énergie inconnue est la seule à expliquer l'accélération de l'expansion de l'univers, une découverte capitale qui a valu le prix Nobel de Physique 2011 à trois scientifiques américains. Différents modèles d'énergie noire s'affrontent. Ils sont tous théoriquement viables et en accord avec les données connues. « Pour les départager, il faut trouver de nouvelles observables. Pour mieux contraindre l'énergie noire, il faut en étudier l'influence à toutes les échelles », explique Yann Rasera, l'un des porteurs du projet (et de BINGO!). Contrairement à l'intuition, l'énergie noire n'agit pas uniquement à de très grandes échelles cosmologiques mais ses effets se ressentent aussi sur les propriétés même d'une galaxie. DEUS, un consortium composé de sous-projets comme DEUSS et DEUS-Hydro, vise à simuler une série d'univers de toutes tailles et suivant différents modèles d'énergie noire, et à en extraire des paramètres qui divergent de l'un à l'autre (taux de formation des étoiles, distribution de matière, nombre de galaxies, etc...). Les mesures futures de ces paramètres dans les grands projets observationnels (comme EUCLID récemment sélectionné par l'ESA) serviront d'arbitrage entre les différentes théories. La gamme d'échelle des simulations, unique en son genre, d'un centième de la taille de notre galaxie à un huitième du volume de l'univers observable, le degré de perfectionnement des codes et les modèles d'énergie noire couverts, font déjà de ces travaux d'ampleur une réussite importante pour la science.

Distribution de la matière noire dans un halo. Les galaxies se forment dans ces halos et leurs propriétés dépendent du modèle d'énergie noire envisagé.

Projets BINGO! et DEUS
LuTh, UMR 8102, Observatoire de Paris/Meudon
Responsable projet : J.-M. Alimi et Y. Rasera
Moyens GENCI : TITANE (CEA/CCRT), JADE (CINES) et BABEL (CNRS/IDRIS)

Projets de recherche issu du **comité thématique « Astrophysique et géophysique » (CT4).** Photo © Jgabany - Creative Commons



AIDER À LA DÉCISION MÉDICALE

Tout organe se caractérise, généralement, par une configuration et une structure compliquées. Son fonctionnement contrôlé localement et à distance est complexe (comportement non-linéaire). L'étude complète d'un organe fait intervenir des processus à différentes échelles : nanoscopique (molécules en interactions générées par les multiples sources de signalisation cellulaire qui déclenchent des cascades de réactions chimiques provoquant la libération de molécules stockées ou la synthèse de protéines), microscopique (cellules en interactions), mesoscopique (tissus biologiques) et macroscopique (organes). Ces études font intervenir toutes les grandes branches de la science : mathématiques, chimie, physique et biologie.

Les applications du calcul scientifique à la santé sont multiples. Elles peuvent être réparties en trois thèmes principaux :
• **la biochimie computationnelle et la dynamique moléculaire** pour décrire les interactions entre substances soit à la surface de la cellule, soit dans les milieux extra- ou intracellulaires, certaines substances en interaction pouvant être exogènes comme les médicaments administrés par voie orale, aérienne ou sanguine ;
• **la bioinformatique** qui aborde les phénomènes biologiques par l'analyse des données (élaboration de logiciels d'analyse des données biologiques) ;
• **les modélisations et simulations** du fonctionnement complexe de cellules et de tissus biologiques ou d'appareils physiologiques à diverses échelles. En général, les processus biologiques aux échelles nano, micro, et mesoscopiques font l'objet de recherches biomathématiques (détermination et résolution d'ensembles d'équations décrivant le processus exploré). Les phénomènes à l'échelle macroscopique des tissues dits durs (squelette) ou mous (organes pleins ou creux, le plus souvent très déformables, incluant certains milieux fluides comme le sang) sont ciblés par des études biomécaniques (mécanique des milieux continus).

En bioinformatique, l'enjeu est de déchiffrer les relations entre génotypes et phénotypes et les corrélations entre le génome des individus, la nutrition, l'environnement et le mode de vie, parmi d'autres facteurs qui influencent l'histoire naturelle des individus - leur santé et les pathologies qui les affectent. L'analyse du cadre transcriptionnel et translationnel (expression allèle-spécifique, expression génique variable selon le contexte, l'épissage alternatif, régulation par les petits RNAs, etc.) est nécessaire pour la mise en évidence des caractères associés aux affections. En résumé, il s'agit, chez un sujet donné, de déterminer son potentiel à développer certains types de pathologies, et, dans la mesure du possible, de prévenir son apparition et, tout au moins de minimiser les complications susceptibles de survenir au cours de l'évolution de cette maladie.

Les modèles des phénomènes biochimiques et biophysiques reposent, le plus souvent, sur des équations aux dérivées partielles d'ordre et de complexité variables. Ces systèmes d'équations n'ont de solutions analytiques que dans des cas très simplifiés, trop éloignés de la réalité. Néanmoins, de tels cas peuvent être exploités pour valider le modèle numérique. En règle générale, la résolution fait appel à l'analyse numérique et aux diverses techniques d'approximation disponibles. L'obtention de la convergence d'une solution stationnaire ou, plus souvent, comme la plupart des phénomènes biologiques dépendent du temps, celle d'une solution instationnaire réclament un temps de calcul très long. La durée du calcul peut devenir incompatible avec l'application médicale. Le chercheur doit alors se tourner vers les techniques de calcul intensif.

En outre, la déformabilité du matériau ainsi que le transport de masse et de chaleur sont souvent associés

aux problèmes à traiter. Ils requièrent le développement de plateformes de couplage multiphysiques faisant appel, une fois de plus, au calcul intensif.

Outre la modélisation mathématique et les simulations des cascades de signalisation cellulaires dynamiques et/ou de la rhéologie des organes en présence ou non de dispositifs médicaux implantables, la modélisation dans le domaine de la santé incorpore également des techniques d'optimisation : traitement des images médicales pour la reconstruction tridimensionnelle des organes, maillages adaptés et adaptatifs pour étudier numériquement leur comportement, recherche de données (data mining) et analyse.

Les biomathématiques et la biomécanique constituent deux approches qui, dans un avenir proche, devraient être couplées. L'objectif est de mieux comprendre de manière à compléter efficacement le bilan diagnostique, planifier et optimiser le traitement, et améliorer le pronostic. Les applications du calcul scientifique à la santé sont, en effet, non seulement multiples quant aux cadres et à l'échelle des phénomènes ciblés, mais encore par le type de support apporté dans la décision médicale - diagnostic, pronostic ou thérapeutique.

Il peut s'agir de mettre en évidence les circonstances qui déclenchent un processus physiologique ou physiopathologique particulier parmi tous les mécanismes possibles. Un autre objectif est de prévoir à plus ou moins long terme le pronostic d'une affection soit en l'absence de traitement dans les cas où les bénéfices sont contrebalancés par les inconvénients, soit après traitement avec les risques de complications.
De nos jours, la thérapeutique fait appel à des techniques invasives de manière minimale, en particulier l'utilisation de nanovecteurs qui empruntent les voies naturelles jusqu'à la région ciblée grâce à la reconnaissance de récepteurs de surface spécifiques ou à l'emploi coordonné d'un agent physique local servant d'attracteur.
Quant aux outils d'aide à l'intervention médicale ou chirurgicale, ils sont de plusieurs types :
• conception et design optimal de dispositifs implantables dans l'organisme ;
• simulateurs médicaux pour l'apprentissage des nouvelles méthodes d'interventions a minima;
• outils de navigation per-opératoire spécifiques aux patients ;
• optimisation du mode opératoire (surface de résection, suture, etc.) pour minimiser la durée d'intervention et le risque de complications per- et post-opératoires.

Actions soutenues en 2011 dans le cadre du comité thématique
« Simulation biomédicale et applications à la santé » (CT3)

• Profilage métagénomique des écosystèmes à l'aide de la plateforme METEOR (porteur du projet : J.-M. Batto, INRA Micalis)
• Bioinformatique avec le code de simulation IMGT (ImMunoGeneTics ; porteur du projet : V. Giudicelli, Université de Montpellier II)
• Modélisation des propriétés structurales et thermodynamiques de phospholipides (porteur du projet : T. Mineva, CNRS)
• Minimisation de dose de traceur radioactif pour une même qualité d'interprétation par une méthode statistique en imagerie PET (porteur du projet : E. Barat, CEA)
• Rôle des microfissures dans la fragilité vertébrale humaine (porteur du projet : H. Follet, Inserm)
• Imagerie fonctionnelle numérique optimisée pour les artères (porteur du projet : F Nicoud, Université de Montpellier II)
• Simulation des grandes échelles pour les écoulements transitionnels instationnaires. Application à la simulation des écoulements sanguins (porteur du projet : S. Mendez, CNRS)

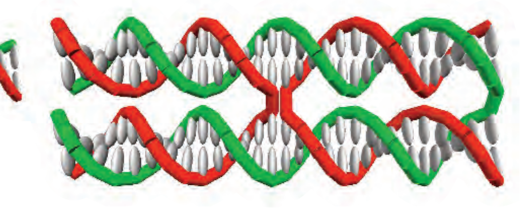


FAIRE PLIER L'ADN

L'acide désoxyribonucléique (ADN) est une molécule présente dans toutes les cellules vivantes, qui renferme l'ensemble des informations nécessaires au développement et au fonctionnement d'un organisme, ainsi que son patrimoine génétique. L'ADN est composé de deux brins, eux-mêmes constitués de bases reliées entre elles (on parle de séquences). Ces deux brins se font face et forment une double hélice grâce à des interactions entre leurs bases respectives. La grande spécificité de ces interactions permet le design de structures bi ou tridimensionnelles à partir de « morceaux » d'ADN. Parmi les applications envisagées, la mise au point d'une « enveloppe » contenant un médicament qui serait libérée directement dans les cellules cibles.

Cet origami-là n'est pas l'art du pliage du papier tel qu'il est pratiqué au Japon mais l'idée s'en inspire… Un origami à base d'ADN est une toute petite structure (de l'ordre du milliardième de mètre) obtenue par « pliage » d'une longue séquence d'un brin d'ADN (l'échafaudage) à laquelle est ajoutée une série de courtes séquences qui vont jouer le rôle d'agrafes et plier l'échafaudage dans la forme souhaitée.

« Afin de comprendre les mécanismes impliqués dans la formation de ces structures, nous sommes partis d'un petit système, formé de trois brins d'ADN de longueurs différentes, explique Juan Elezgaray, responsable du projet. Plus précisément, nous avons ont travaillé à partir d'un modèle effectif d'ADN où un simple brin est vu comme une suite connectée de billes sur un réseau triangulaire 3D ».



Deux types de structures simulées à quatre et trois brins
© CBMN

L'équipe de recherche a montré que les propriétés thermodynamiques de ces systèmes ne sont pas uniquement dictées par leur séquence, ce qui était jusqu'alors généralement admis, mais également par leur agencement spatial.

Les énergies d'appariement entre deux brins sont celles du modèle plus proche voisin. Si le calcul des propriétés thermodynamiques est possible de façon « exacte » pour des structures usuelles (linéaires) d'ADN, les contraintes de courbure imposées par le pliage des origamis ADN nécessitent un traitement numérique par des simulations de type Monte Carlo.

Cette étude a permis de simuler des cycles de pliage-dépliage pour des structures non linéaires à trois et quatre brins d'ADN, et de mettre en lumière des mécanismes de pliage « coopératifs », où la présence d'un brin peut faciliter l'hybridation d'un autre brin. Elle a également montré que la topologie du motif d'hybridation a une importance pour déterminer des propriétés telle que la température de fusion de ces structures, température à laquelle les brins se désapparient.

Pliage de petits origamis
Chimie et Biologie des Membranes et des Nano-objets (CBMN, UMR5248, Bordeaux)
Responsable projet : J. Elezgaray
Moyens GENCI : JADE (CINES)

Projet de recherche issu du **comité thématique « Systèmes moléculaires organisés et biologie » (CT7).** Photo © Flickr - Creative Commons



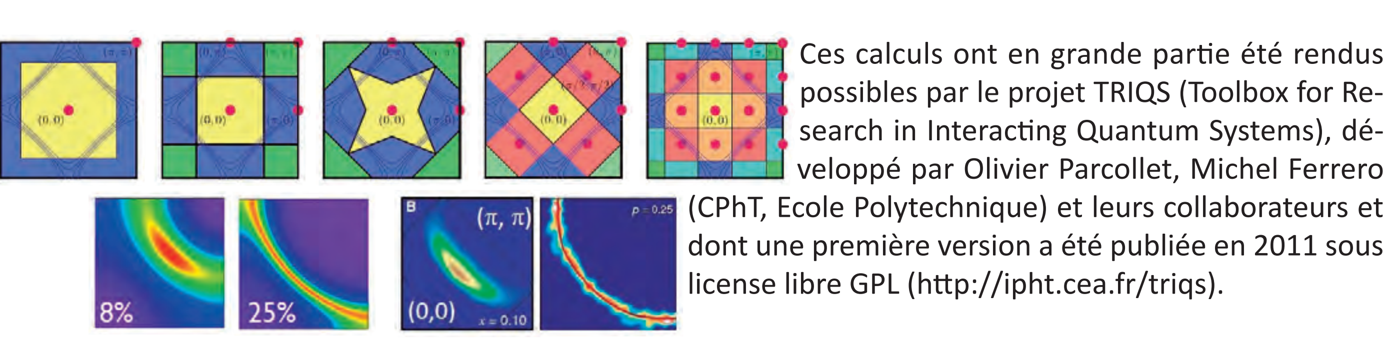
EXPLORER LA SUPRACONDUCTIVITÉ

Les matériaux qualifiés de « systèmes quantiques fortement corrélés » constituent un défi central de la physique de la matière condensée. Ces matériaux sont tels que les interactions entre électrons induisent des effets physiques nouveaux. C'est le cas de certains oxydes de cuivre qui présentent notamment des propriétés supraconductrices non conventionnelles (supraconductivité haute température) mais aussi un ensemble de phases qui leur sont propres à température ambiante. Une étude extensive de ces matériaux est indispensable en vue des perspectives d'applications technologiques qu'ils offrent : nouveaux supraconducteurs, meilleurs thermoélectriques, interfaces composées de ce type de matériaux…

Il est alors nécessaire d'introduire, pour ce type de matériaux, de nouveaux concepts relatifs au comportement collectif des électrons. Par exemple, la nature du mécanisme à l'origine de la supraconductivité haute température n'est toujours pas établie bien qu'un consensus se dégage sur le fait que l'appariement des électrons (paires de Cooper) est dû à un mécanisme purement électronique et non à une interaction électron-atome comme dans la supraconductivité conventionnelle.

« Bien que la structure de ces matériaux soit bien connue, un calcul direct de leurs propriétés est hors de portée, souligne Olivier Parcollet, responsable du projet. Il est donc impératif de dégager les degrés de liberté collectifs émergeant à basse énergie afin de construire de nouvelles approches théoriques et algorithmiques pour rendre compte de leurs propriétés physiques ».

Les progrès récents dans les formalismes et dans les algorithmes de solution associés ont permis d'étudier les supraconducteurs à haute température critique. « Les propriétés de la phase normale et de la phase supraconductrice des cuprates supraconducteurs ont été abordées grâce à ces algorithmes et nous avons pu construire un modèle théorique minimal décrivant la phénoménologie des cuprates supraconducteurs, en excellent accord avec les expériences », précise le chercheur.



Ces calculs ont en grande partie été rendus possibles par le projet TRIQS (Toolbox for Research in Interacting Quantum Systems), développé par Olivier Parcollet, Michel Ferrero (CPhT, Ecole Polytechnique) et leurs collaborateurs et dont une première version a été publiée en 2011 sous license libre GPL (http://ipht.cea.fr/triqs).

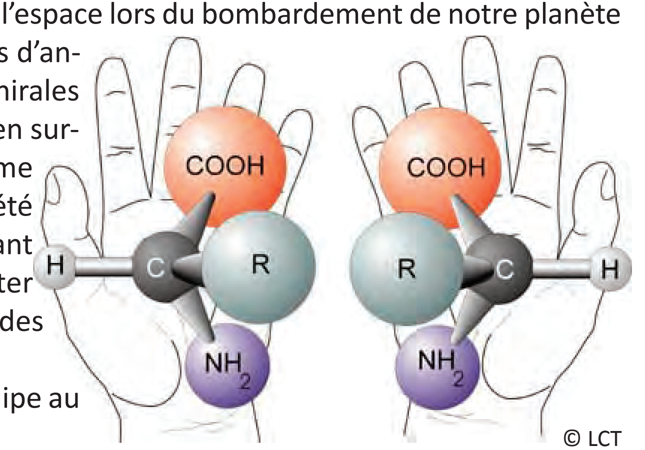
Systèmes quantiques fortement corrélés
Institut de physique théorique (CEA/CNRS)
Responsable projet : O. Parcollet
Moyens GENCI : TITANE (CEA/CCRT)

Projet de recherche issu du **comité thématique «Physique théorique et physique des plasmas » (CT5).** Photo © Jubobroff - Creative Commons

SONDER LES ORIGINES DE LA VIE

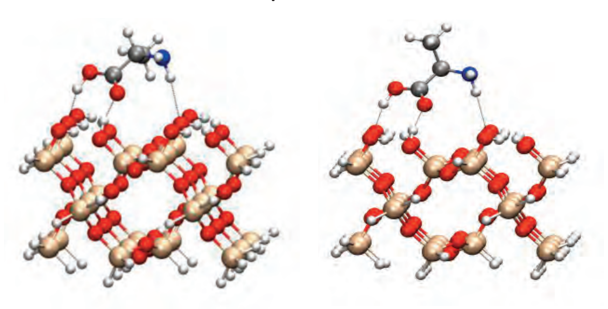
La vie, telle que nous la connaissons aujourd'hui sur Terre, est indissociable d'une propriété structurale des molécules connue sous le terme de « chiralité ». En chimie, un composé est dit chiral (du grec chiros, la main) s'il n'est pas superposable à son image dans un miroir, comme la main droite dont l'image dans un miroir est une main gauche. Une molécule chirale possède deux formes opposées (ou énantiomères) : une gauche, faisant tourner le plan de polarisation de la lumière dans le sens inverse des aiguilles d'une montre (notée L pour lévogyre) et une droite (notée D pour dextrogyre). Par un phénomène encore inconnu, les molécules qu'on retrouve dans les êtres vivants sur Terre ne sont présentes que sous l'une des deux formes : les aminoacides biologiques sont L et les sucres D.

Deux hypothèses s'affrontent quant à l'origine de la vie sur Terre. Soit elle a émergé localement sur notre planète bleue, soit elle provient de molécules importées de l'espace lors du bombardement de notre planète par des météorites et des comètes, il y a plusieurs milliards d'années. La découverte, dans les météorites, de molécules chirales avec un léger excès énantiomérique (l'une des formes est en surnombre) semble faire pencher la balance pour la deuxième hypothèse. Problème : aucune molécule chirale n'a jamais été détectée dans l'espace interstellaire. Et même en admettant qu'il existe, dans l'espace, des conditions capables d'abriter des molécules chirales, le mécanisme qui privilégie l'une des deux formes sur l'autre est encore à découvrir.
C'est ce problème qui intéresse Françoise Pauzat et son équipe au Laboratoire de Chimie Théorique (LCT) de Paris VI.



© LCT

Parmi les hypothèses envisagées, Françoise Pauzat a privilégié celle selon laquelle une des formes, L ou D, s'attacherait préférentiellement à la surface d'un minéral, ce qui lui permettrait alors de s'incorporer majoritairement dans les météorites et de voyager ainsi jusqu'à la Terre. En s'appuyant sur les principes de la chimie quantique, les chercheurs ont simulé l'interaction entre un solide chiral, le quartz-α, et les deux formes chirales du plus simple des aminoacides, l'alanine. Par deux méthodes numériques différentes, et en combinant puissance brute de calcul et intuition chimique, ils trouvent qu'une des formes se fixe plus facilement sur le quartz que l'autre, donnant lieu à une sélectivité moyenne faible mais significative.
L'une de ces simulations, illustrée ci-contre, montre clairement que les deux formes s'attachent différemment à la surface du solide. Est-ce suffisant pour expliquer que c'est en se fixant sur un solide de ce type que se trouvent favorisées certaines formes ? Probablement pas, mais la piste s'esquisse. Et, comme souvent dans la recherche, cela ouvre autant de questions que cela n'en résout.

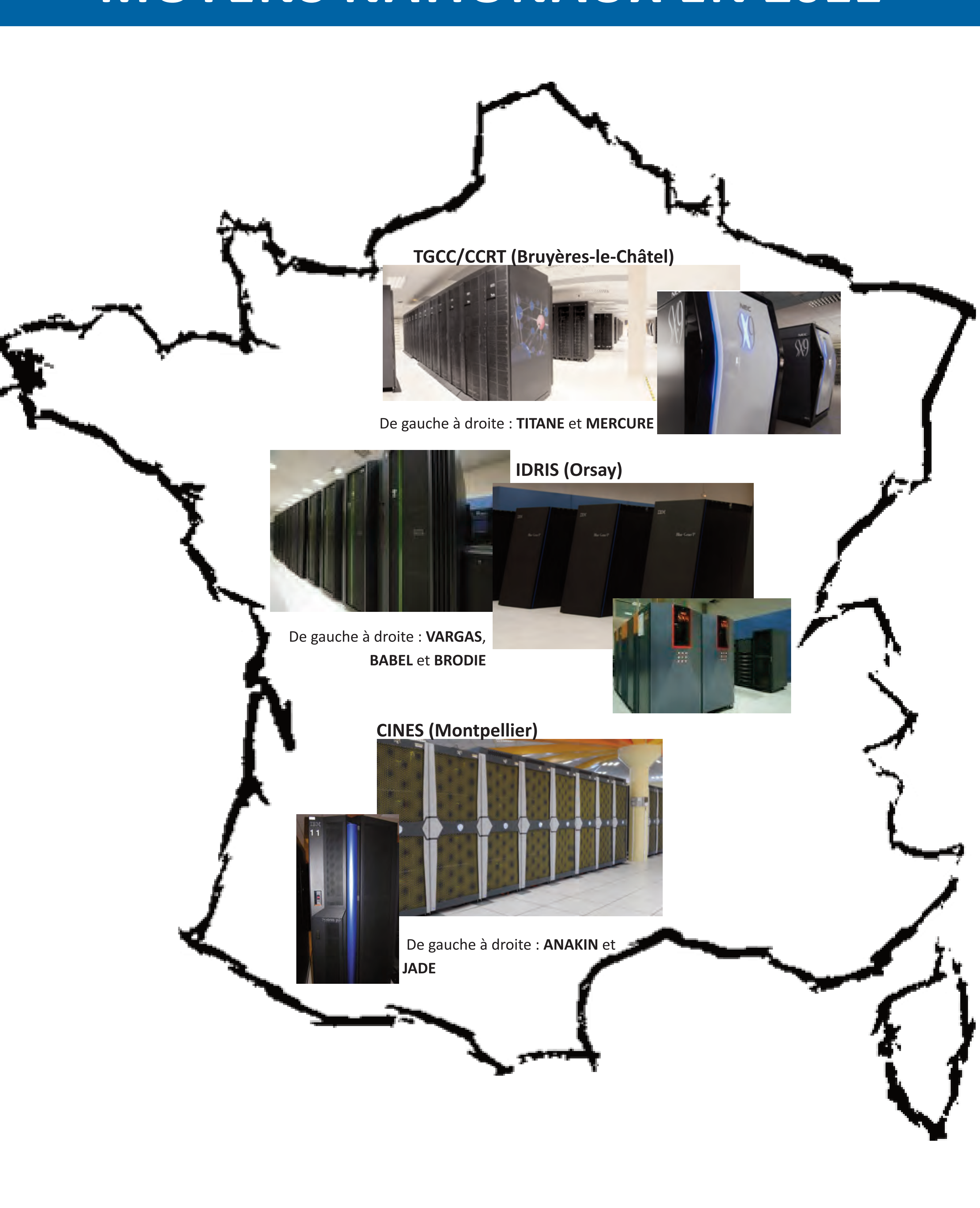


Adsorption de la L-alanine et de la D-alanine à la surface du quartz © LCT

Adsorption sélective comme mécanisme d'enrichissement énantiomérique
Laboratoire de Chimie Théorique (UMR7616, UPMC, Paris VI)
Responsable : F. Pauzat
Moyens GENCI : JADE et YODA (CINES)

Projet de recherche issu du **comité thématique « Chimie quantique et modélisation moléculaire» (CT8).** Photo © Flickr - Creative Commons

MOYENS NATIONAUX EN 2011



TGCC/CCRT (Bruyères-le-Châtel)

De gauche à droite : **TITANE** et **MERCURE**

IDRIS (Orsay)

De gauche à droite : **VARGAS**, **BABEL** et **BRODIE**

CINES (Montpellier)

De gauche à droite : **ANAKIN** et **JADE**

Un bon cru 2011

Les présidents des dix comités thématiques de GENCI reviennent sur le bilan 2011 de leurs disciplines respectives et tracent des perspectives pour les années à venir. Tous soulignent la qualité des dossiers déposés et des résultats obtenus sur les moyens de GENCI qui ont fait l'objet, dans de très nombreux cas, de publications dans des revues à comité de lecture. Ils sont également unanimes à prévoir des simulations de plus en plus poussées de problèmes complexes, multi-échelles et multi-phyisques, réalisées, dans certains domaines (comme la chimie quantique et la modélisation moléculaire), davantage en lien avec l'expérimentation.

QUEL BILAN TIREZ-VOUS DE L'ANNÉE ÉCOULÉE ?



Patrick Mascart (CT1) : En 2011, le CT1 (sciences du climat, de l'océan et de l'atmosphère) a sélectionné 58 projets, un nombre constant par rapport à 2010. Il s'agit, en grande majorité, de projets ayant une durée de vie sur plusieurs années, ce qui est dans la logique des développements logiciels importants liés à la modélisation climatique : 8 projets sont de nouveaux projets, 50 sont des projets pluriannuels. Ces projets ont donné lieu en 2011 à une centaine de publications dans de très bons journaux internationaux à comité de lecture tels que Nature, Journal of Climate, Journal of the Atmospheric Sciences, Journal of Fluid Mechanics, Atmospheric Chemistry and Physics, Ocean Modelling, Deep Sea Research, Journal of Physical Oceanography, Journal of Geophysical Research, Tellus…).



Luc Vervisch (CT2) : Avec 164 projets, 2011 s'est caractérisé par une augmentation des volumes de calculs, à la fois en termes de temps et de mémoire. Par ailleurs, les résultats obtenus ont été publiés dans les meilleures revues scientifiques spécialisées en mécanique des fluides et à ses applications, par exemple le Journal of Fluid Mechanics, Physics of Fluids, Combustion and Flame ou encore International Journal of Multiphase Flow. Des travaux visant à développer les modèles physiques et les méthodes de demain ont également été publiés dans la Physical Review Letters.



Marc Thiriet (CT3) : Les propositions soumises aux appels à projets de GENCI appartiennent à divers grands axes : la bio-informatique, l'imagerie médicale, la biochimie computationnelle et la biomécanique.

Nous avons eu, en 2011, deux nouveaux dossiers et cinq en renouvellement.



Edouard Audit (CT4) : Sur nos 50 projets, 15 projets sont nouveaux, soit un taux de renouvellement relativement important mais constant depuis plusieurs années.
La répartition entre astrophysique et géophysique est stable : 34 projets en astrophysique et 16 en géophysique. 19 projets bénéficient d'un soutien de l'ANR, 4 d'une bourse ERC et 20 d'autres types de financement. Ces chiffres sont en augmentation sensible depuis plusieurs années.
L'année 2011 n'a pas connu d'évolution thématique importante. Les dossiers sont de bonne qualité et la communauté progresse régulièrement vers le parallélisme massif.

Sylvie Jacquemot (CT5) : En 2011,



environ 176 millions d'heures ont été attribuées aux 38 dossiers évalués. La qualité des propositions est remarquable et la pression reste importante : environ 45 % du temps demandé seulement a été alloué.
Si une majorité de projets s'inscrivent dans la thématique « Plasmas Chauds » (près de 45 %), la QCD (Chromodynamique quantique) sur réseau reste la plus grande consommatrice d'heures (81 %).
Vingt-huit articles, qui remercient d'ailleurs GENCI pour son soutien et l'accès à ses ressources de calcul, sont parus en 2011 dans des journaux à comité de lecture, dont notamment quatre dans la Physical Review Letters.



Jacques Blum (CT6) : Les 23 dossiers soumis et retenus en 2011 ont un très bon niveau. Ils se répartissent à peu près également en deux catégories : ceux ayant trait à l'algorithmique du calcul parallèle sous toutes ses formes et ceux plus spécifiquement dédiés à des thèmes applicatifs. L'ensemble de ces travaux a donné lieu, en 2011, à au moins 35 publications dans des journaux à comité de lecture ou des actes de conférences internationales soumis à référés.

Yves-Henri Sanejouand (CT7) : 59 projets ont été retenus en 2011.



La qualité des dossiers est très correcte, avec un noyau dur d'habitués particulièrement productifs.

Marie-Bernadette Lepetit (CT8) : 97 projets ont été retenus en 2011 et ont donné lieu à 224 publications dans des revues à comité de lecture.
Les dossiers soumis sont pour l'essentiel de bonne qualité, à la fois en termes de rédaction et de montage du projet, de justification et d'évaluation des moyens demandés que de résultats scientifiques visés.



Alain Pasturel (CT9) : Le bilan de l'année 2011 montre une stabilité du nombre de projets avec un peu moins d'une centaine de projets structurés autour d'équipes comprenant trois à quatre permanents, en moyenne. 70 % de ces projets ont été jugés excellents et le taux de rejet (3 %) est faible.
Les projets retenus ont une très bonne activité de publications. Et les domaines applicatifs sont très variés : énergie, environnement, santé, nanotechnologies.

Thierry Massard (CT10) : Nous traitons à la fois des thématiques transverses à plusieurs disciplines et des thématiques industrielles.



Si les demandes ont été faibles en nombre, elles étaient, globalement, de très bonne qualité. Les thématiques abordées relèvent davantage du domaine de la recherche que de l'industrie mais présentent néanmoins un intérêt fort pour les sciences de l'ingénieur.
En 2011, sept dossiers ont été instruits et tous ont été retenus, mais ont donné lieu pour certains à des abattements quant au nombre d'heures demandées.

QUELLES PERSPECTIVES ENVISAGEZ-VOUS ?

Patrick Mascart (CT1) : Les perspectives s'inscrivent dans la continuité des projets 2011.
L'année 2012 va être marquée par les post-traitements d'analyse des simulations climatiques du GIEC.
Ces simulations impliquent des travaux importants pour rendre les résultats accessibles à toute la communauté internationale via un système élaboré de bases de données réparties dans le monde. Les simulations climatiques régionales à très haute résolution vont monter en puissance, comme le projet CORDEX qui ambitionne de simuler le climat sur toute l'Europe à une résolution déca-kilométrique durant les prochaines 150 années. C'est une amélioration d'un facteur 100 par rapport aux travaux antérieurs.
Autre fait majeur, l'année 2012 verra démarrer les travaux de modélisation environnementale sur CURIE, qui permettra d'améliorer sensiblement les capacités de calcul disponible, alors que la charge devient pénalisante sur les machines nationales, comme VARGAS et JADE. À plus long terme, l'évolution du calcul intensif parallèle permettra d'aborder des études à résolution élevée dans toutes les disciplines, aussi bien océaniques qu'atmosphériques ; et aussi de modéliser des processus de plus en plus « interdisciplinaires » qui couplent, par exemple, géochimie, processus biologiques, turbulence, grands cycles naturels du carbone, du soufre etc.
Il s'agit de s'approcher progressivement de la modélisation de tous les processus du « Système Terre » en vraie grandeur et à de multiples échelles de temps.

Luc Vervisch (CT2) : L'un des chantiers importants qui attend les équipes des laboratoires et des instituts participants du domaine de la mécanique des fluides, sera la consolidation de la mutualisation des outils de simulation, sur des plateformes logicielles partagées, dont l'architecture est spé-

cialisée dans le calcul parallèle intensif et le traitement de grands volumes de données.

Edouard Audit (CT4) : Les objectifs sont la poursuite de la parallélisation des codes pour exploiter pleinement les machines, notamment les Tier0 ; et ce afin d'accroître la résolution spatiale et temporelle des problèmes traités et d'obtenir des simulations avec des modèles physiques plus réalistes.

Sylvie Jacquemot (CT5) : Les très grands instruments de recherche en cours de construction sont des moteurs très efficaces de développement du calcul intensif en physique des plasmas. Cependant, ils nécessitent, notamment en terme de dimensionnement, de pouvoir effectuer des simulations réalistes, c'est-à-dire tridimensionnelles et sur des échelles en temps et en espace pertinentes. Ces simulations ne pourront être envisagées que si la puissance, la mémoire et le nombre de processeurs continuent à augmenter dans les années à venir.
Une telle augmentation devra bien sûr être accompagnée d'un accroissement des capacités de stockage et du développement de logiciels de visualisation performants.

Cette tendance se retrouve également dans d'autres domaines de la physique, par exemple dans celui de la compatibilité électromagnétique pour lequel la simulation d'objets à l'échelle 1 peut aujourd'hui être envisagée.
En dehors de l'attractivité des grands projets, la mise à disposition de codes performants, sous licence libre, comme TRIQS pour la modélisation des systèmes quantiques, devrait contribuer efficacement à accroîtrela communauté.

Jacques Blum (CT6) : Les perspectives sont très favorables. En effet l'algorithmique vers l'exascale est appelée à se développer de façon importante pour que les méthodes numériques de résolution tirent parti au mieux des performances des machines parallèles.

Les efforts à faire aussi bien en informatique du calcul parallèle (communication entre processeurs,..) qu'en algorithmique numérique sont encore importants.
La grande diversité des calculateurs mis à disposition de la communauté nationale par GENCI est très importante pour expérimenter numériquement : beaucoup de projets demandent des heures, en nombre limité, sur plusieurs machines car l'objectif est la mise au point et la validation de méthodes, qui est la spécificité du CT6.

Yves-Henri Sanejouand (CT7) : La première simulation de plus d'une milliseconde d'une protéine décrite à l'échelle atomique (et en solvant « explicite ») a été publiée en 2010. Elle avait été réalisée avec Anton, une machine spécialisée construite autour de 512 ASICs.

Depuis lors, grâce à cette machine, de petites protéines (jusqu'à 80 acides aminés) ont pu être repliées « ab initio », pour la première fois : en partant d'une forme désordonnée, il a été possible, à l'issue d'une simulation réaliste, d'obtenir leur structure tridimensionnelle.

Par ailleurs, ce type de simulation a permis de comparer les divers « champs de force » et d'en améliorer certains : pour la première fois, on pouvait accéder par le calcul au minimum d'énergie global d'un système (vraiment) complexe, en termes de nombre de dimensions effectives.
Ces simulations vont se multiplier rapidement, aussi rapidement que des machines du type Anton deviendront accessibles.

Marie-Bernadette Lepetit (CT8) : Depuis quelques années, dans le domaine de la chimie quantique et de la modélisation moléculaire, on observe la prise en compte d'aspects thermodynamiques et une interaction plus grande avec les aspects expérimentaux (compréhension des résultats obtenus par l'expérience).

Plus récemment, on observe également une montée en puissance de l'utilisation du calcul pour explorer les domaines du possible préalablement aux manips.

Cette évolution de fond devrait se poursuivre. Elle est liée à l'amélioration tant des méthodes que des codes, et des performances des calculateurs qui ont permis d'atteindre des tailles de systèmes, des complexités et des précisions numériques compatibles avec les problèmes expérimentaux.

Alain Pasturel (CT9) : Dans le domaine de la physique, de la chimie et des matériaux, et pour ce qui concerne les simulations de type ab initio, on va vers des calculs de plus en plus exacts et un spectre de propriétés étudiées de plus en plus large.

Pour ce qui concerne les simulations multi-échelles, le développement de nouvelles stratégies de calcul permettant d'intégrer les différentes échelles (spatiales et temporelles) de calcul pour aider à la conception de nouveaux matériaux est à prévoir.

Thierry Massard (CT10) : Nous manquons de sujets à vocation industrielle ; ces aspects devraient être davantage développés.
Il faut poursuivre les efforts d'information et de communication auprès des chercheurs de ces domaines.

Attribution des heures sur les moyens nationaux

APPELS À PROJET
2 sessions par an
Dépôt des demandes sur www.edari.fr

ÉVALUATION SCIENTIFIQUE
Dix comités thématiques (CT)

COMITÉ D'ÉVALUATION
Evaluation scientifique des projets et proposition d'attribution

Président : le président du CSCI
Membres : les présidents des comités thématiques
Invités : les directeurs des centres de calcul
& un représentant par associé de GENCI

COMITÉ D'ATTRIBUTION
Arbitrage

Président : le PDG de GENCI
Membres : les présidents du comité d'évaluation
& les directeurs des centres de calcul
Invités : les présidents des comités thématiques
& un représentant par associé de GENCI

ATTRIBUTION

Deux ***appels à projets*** *sont organisés chaque année pour tout utilisateur (académique ou industriel) souhaitant accéder aux moyens de calcul nationaux pour des travaux relevant d'une mission de service public de recherche ou d'enseignement supérieur.*

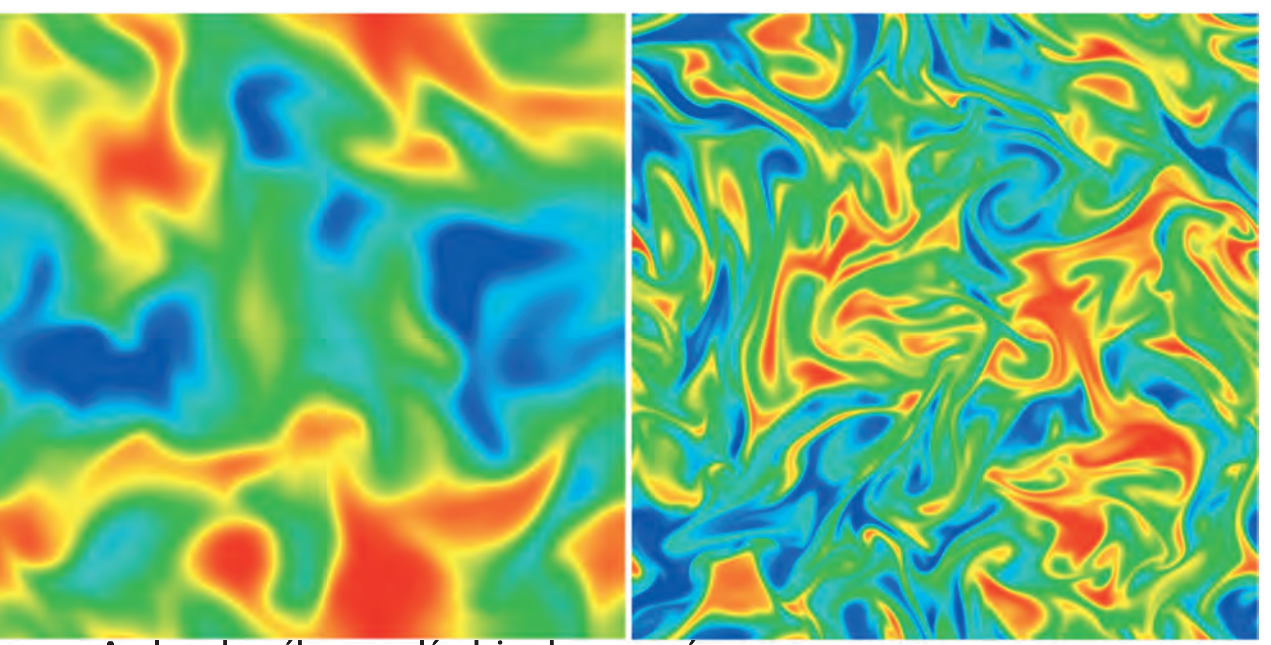
Le premier appel à projets a lieu durant le dernier trimestre de l'année n-1 pour une attribution des heures au 1er janvier de l'année n ; il concerne le dépôt de nouveaux projets ou le renouvellement de projets existants.
Le second appel à projets, complémentaire, est réalisé durant le deuxième trimestre de l'année n pour une attribution au 1er juillet de la même année ; il concerne le dépôt de nouveaux dossiers ou des demandes complémentaires pour les dossiers acceptés lors de la première session.

Le dépôt des demandes se fait sur le site ***www.edari.fr***
Leur sélection est réalisée sur la base de l'excellence scientifique du projet de recherche, avec obligation d'en publier les résultats.

Pour inciter les utilisateurs à consommer régulièrement les ressources qui leur ont été attribuées, une procédure d'ajustement est réalisée à la fin du premier trimestre de l'année n. L'application de ces modalités d'ajustement peut entrainer une reprise d'heures allant jusqu'à 40 % des heures initialement attribuées.

Par ailleurs, tout au long de l'année, des compléments d'heures peuvent être accordés de manière exceptionnelle à des projets existants ; ces demandes dites « au fil de l'eau » sont faites au travers du portail DARI.

Quelques images de calcul



Analyse du mélange moléculaire de composés

Laboratoire des Ecoulements Géophysiques et Industriels (LEGI) - Université, INP de Grenoble & CNRS

Equipe : Y. Fabre, G. Balarac

Moyens GENCI : BABEL (CNRS/IDRIS)

Comité thématique « Mécanique des fluides, fluides réactifs, fluides complexes » (CT2)

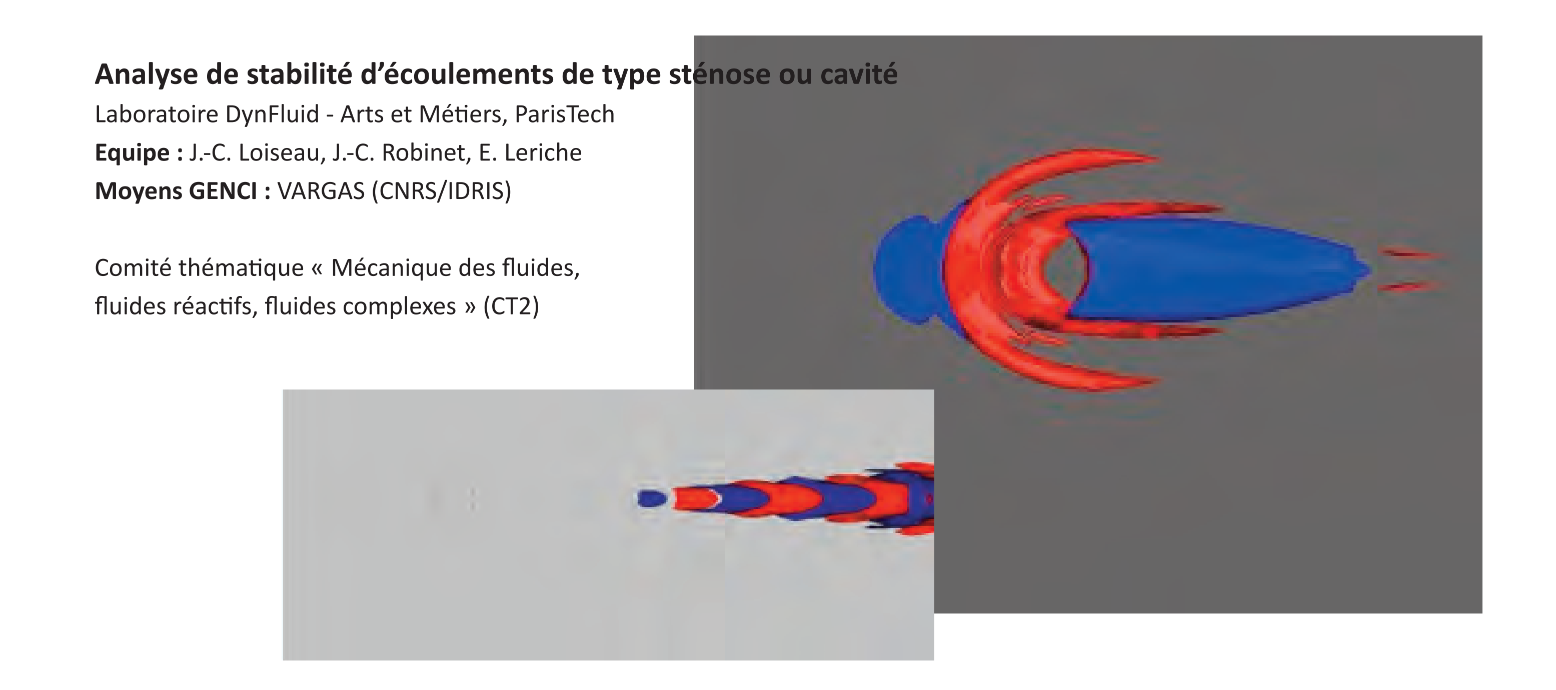
Analyse de stabilité d'écoulements de type sténose ou cavité

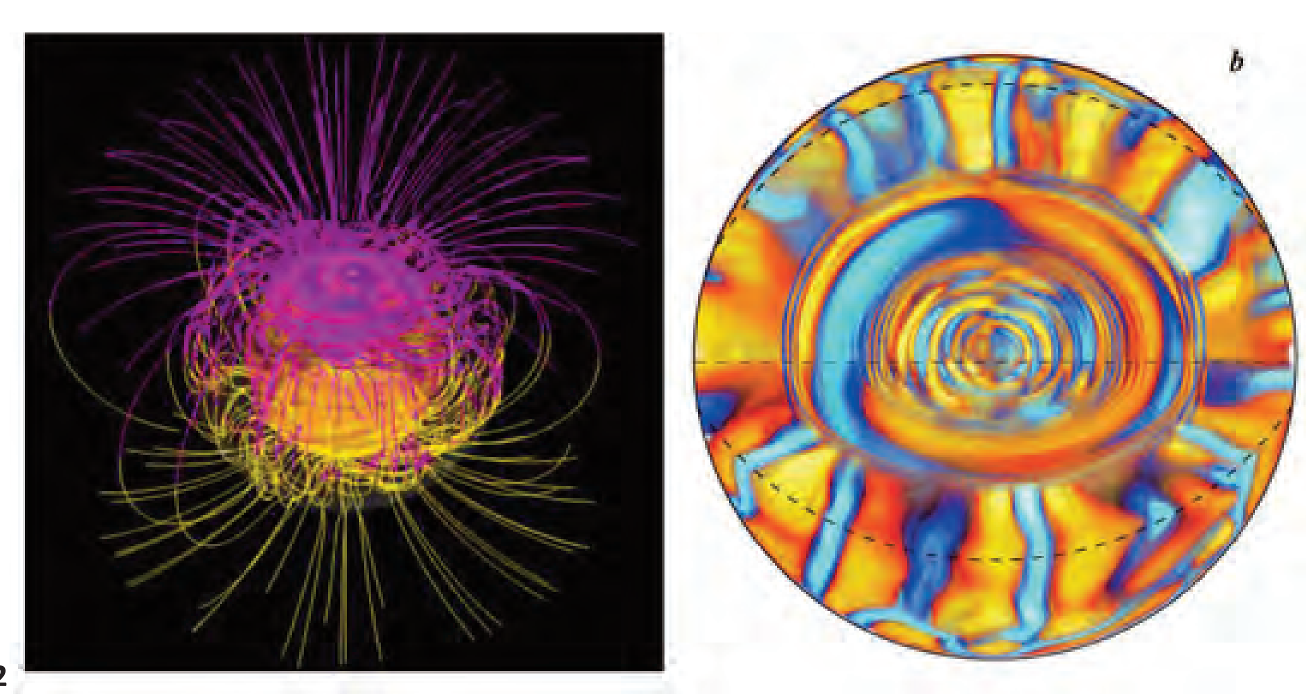
Laboratoire DynFluid - Arts et Métiers, ParisTech

Equipe : J.-C. Loiseau, J.-C. Robinet, E. Leriche

Moyens GENCI : VARGAS (CNRS/IDRIS)

Comité thématique « Mécanique des fluides, fluides réactifs, fluides complexes » (CT2)





Projet STARS2

Simulations de la Turbulence, de l'Activité et de la Rotation du Soleil et des étoileS

CEA/Direction des sciences de la matière (CEA/DSM/IRFU/SAp/LDEE, UMR AIM 7158)

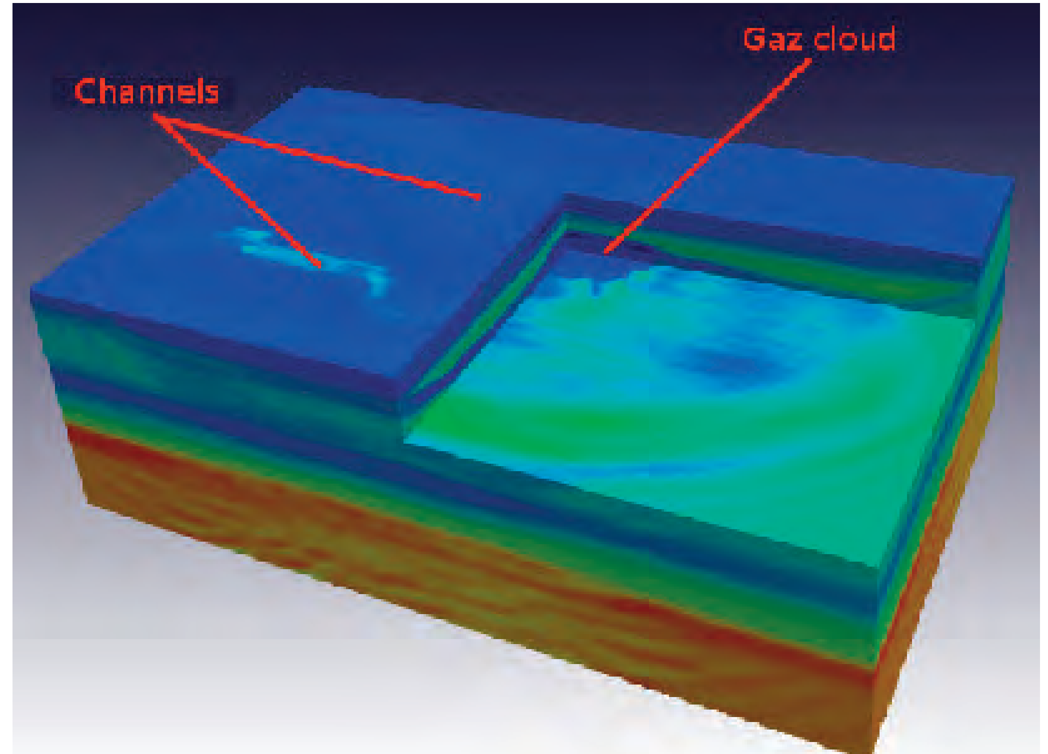
Responsable projet : A. S. Brun

Moyens GENCI : TITANE (CEA/CCRT), JADE (CINES), VARGAS (CNRS/IDRIS)

Comité thématique « Astrophysique et géophysique » (CT4)

Projet SEISCOPE

Imagerie du sous-sol en trois dimensions par inversion des formes d'ondes complètes



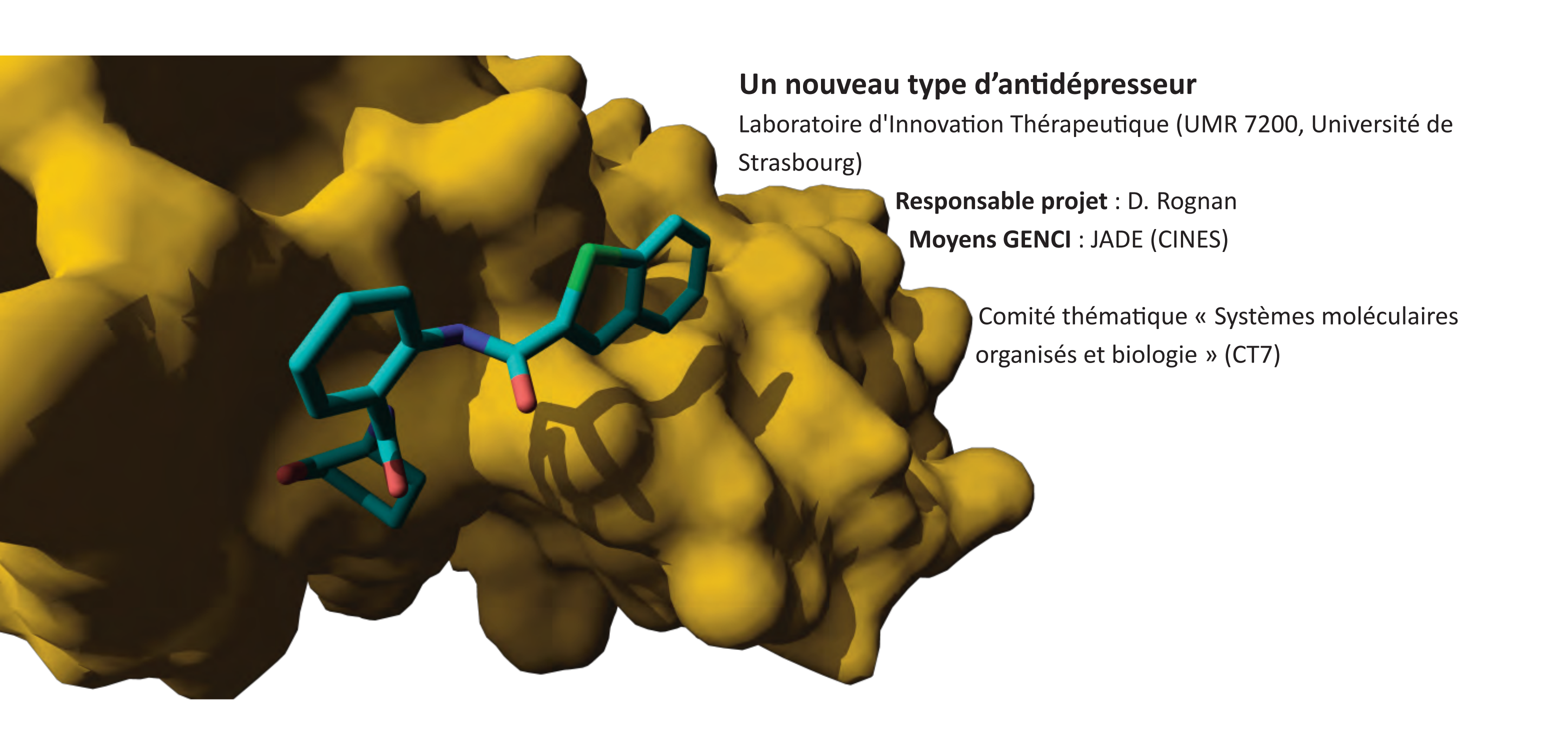
Geoazur

Responsable projet : S. Operto

Moyens GENCI : BABEL (CNRS/IDRIS)

Comité thématique « Astrophysique et géophysique » (CT4)

Quelques images de calcul



Un nouveau type d’antidépresseur

Laboratoire d'Innovation Thérapeutique (UMR 7200, Université de Strasbourg)

Responsable projet : D. Rognan

Moyens GENCI : JADE (CINES)

Comité thématique « Systèmes moléculaires organisés et biologie » (CT7)

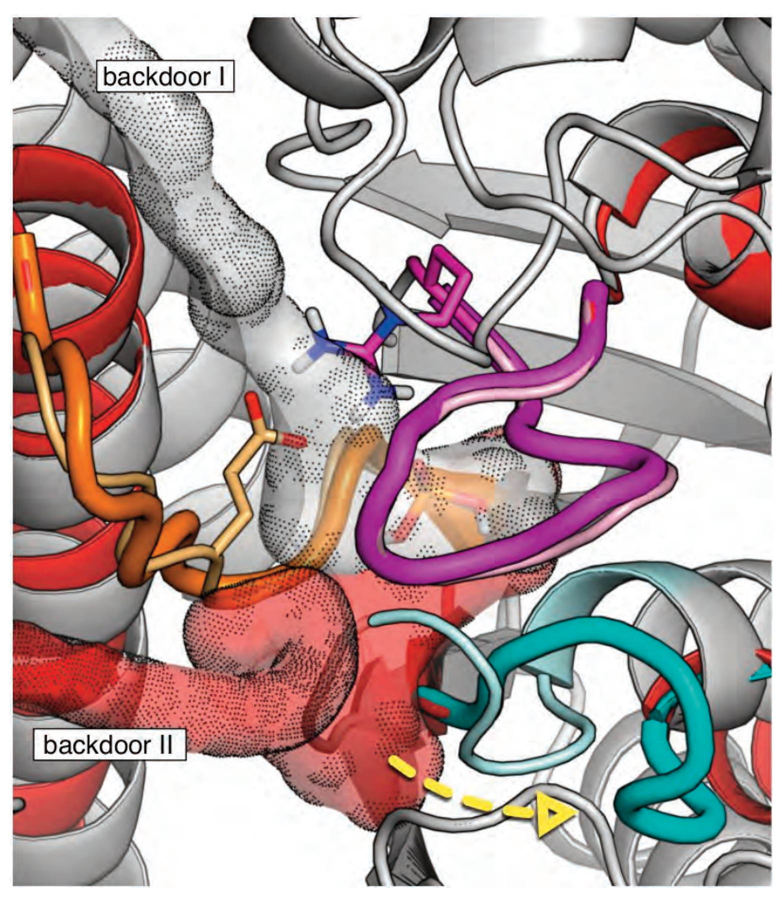
Etude du fonctionnement du muscle à l'échelle moléculaire

Laboratoire d'Ingénierie des Fonctions Moléculaires, ISIS (Strasbourg)

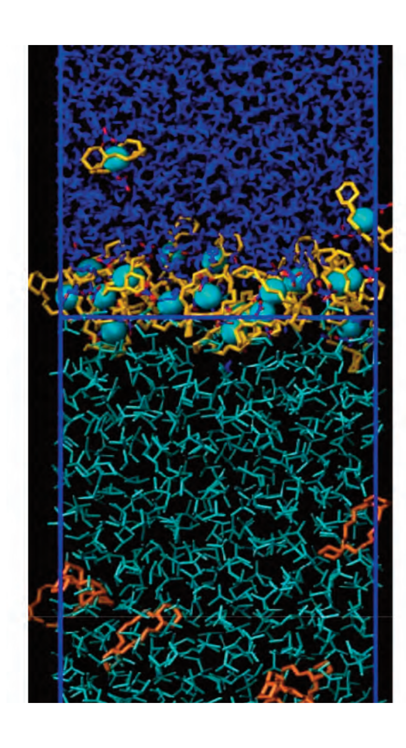
Responsable projet : M. Cecchini

Moyens GENCI : TITANE (CEA/CCRT) et VARGAS (CNRS/IDRIS)

Comité thématique « Systèmes moléculaires organisés et biologie » (CT7)



Quelques images de calcul



Simulation d'ions en solutions : solvatation, complexation, tri sélectif et processus d'assemblage

Laboratoire de Modélisation et Simulations Moléculaires (UMR7177, Université de Strasbourg)

Responsable projet : G. Wipff

Moyens GENCI : JADE (CINES) et VARGAS (CNRS/IDRIS)

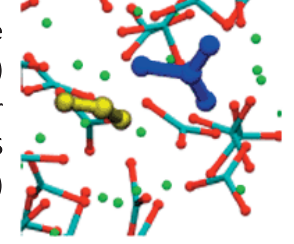
Comité thématique « Systèmes moléculaires organisés et biologie » (CT7)

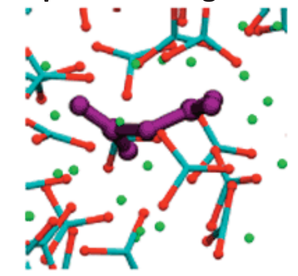
Simulation de la structure et des propriétés de transport des magmas carbonatés

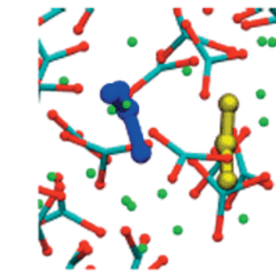
Laboratoire de Processus d'Activation Sélectif par Transfert d'Energie Uni électronique ou Radiative (École Normale Supérieure)

Responsable projet : R. Vuilleumier

Moyens Genci : JADE (CINES) et VARGAS (CNRS/IDRIS)

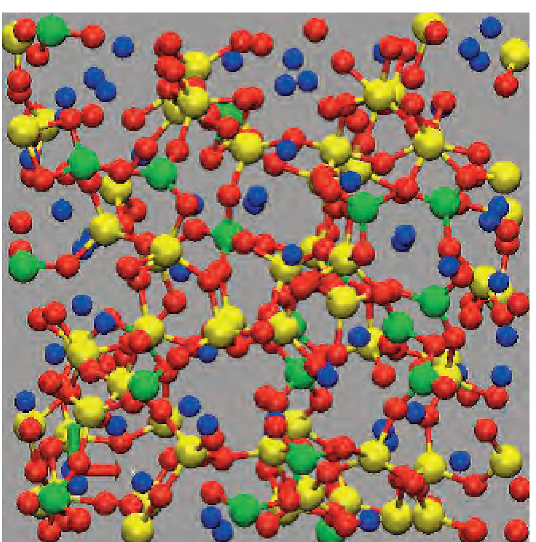






Comité thématique « Chimie quantique et modélisation moléculaire » (CT8)

Modélisation de verres et liquides silicatés d'intérêt industriel

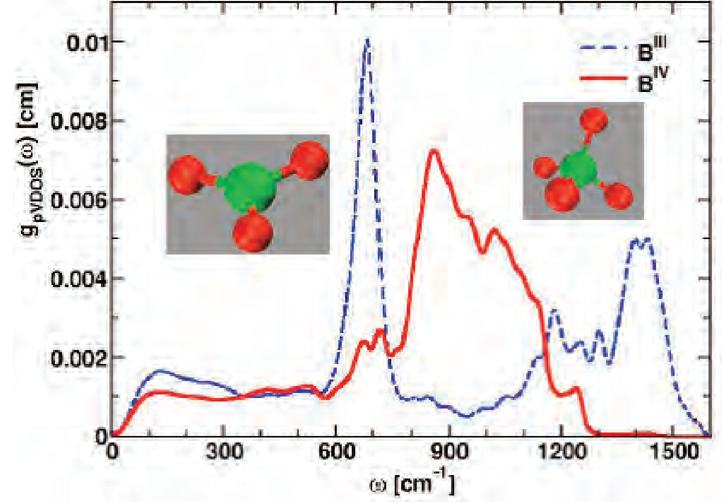


Laboratoire Charles Coulomb (UMR5221, CNRS et Université Montpellier2)

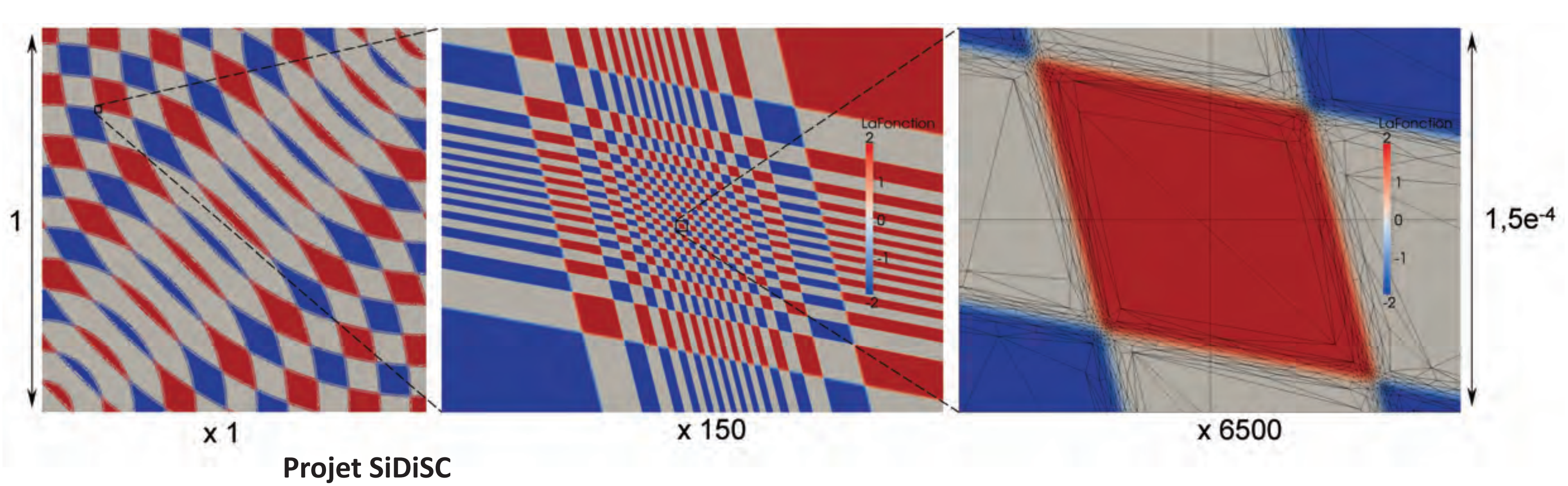
Responsables projet : L. Pedesseau, S. Ispas et W. Kob

Moyens GENCI : TITANE (CEA/CCRT), JADE (CINES) et VARGAS (CNRS/IDRIS)

Comité thématique « Physique, chimie et propriétés des matériaux » (CT9)

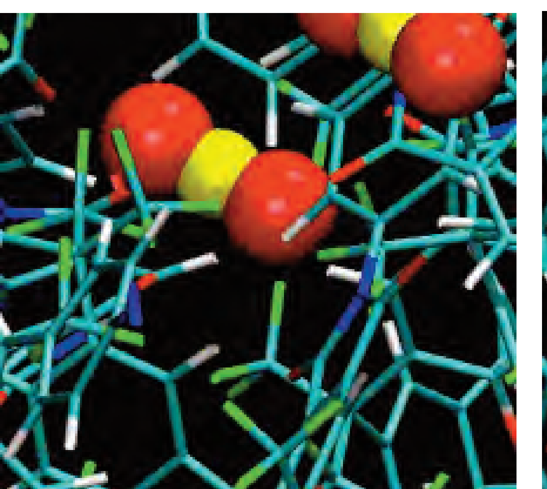


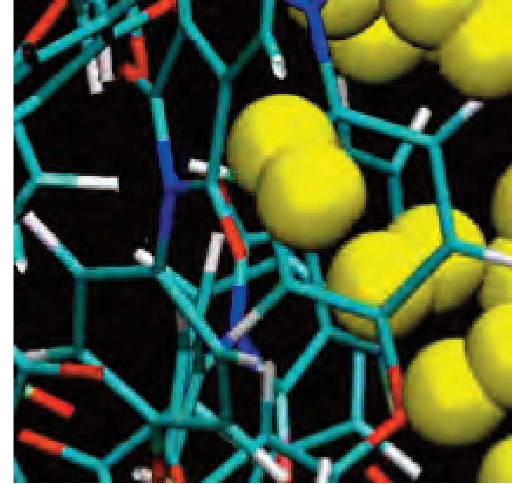
Quelques images de calcul

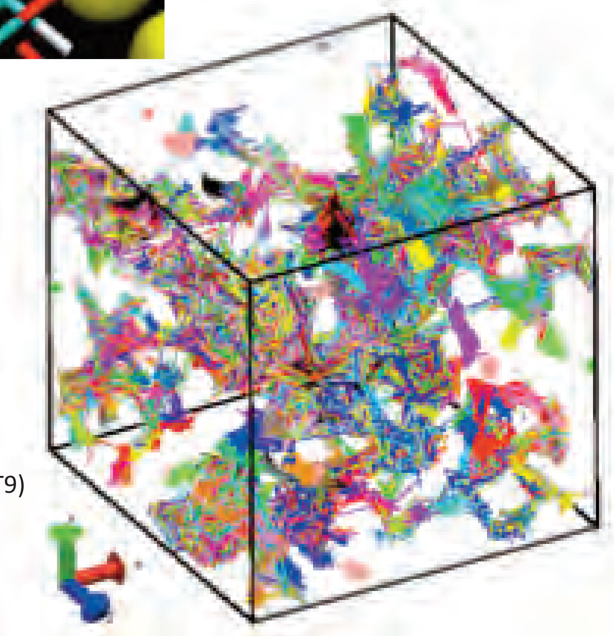


Projet SiDiSC
Centre de mise en forme des matériaux (CEMEF, Mines ParisTech)
Responsable projet : H. Digonnet
Moyens GENCI : JADE (CINES)

Comité thématique « Informatique, algorithmique et mathématiques » (CT6)

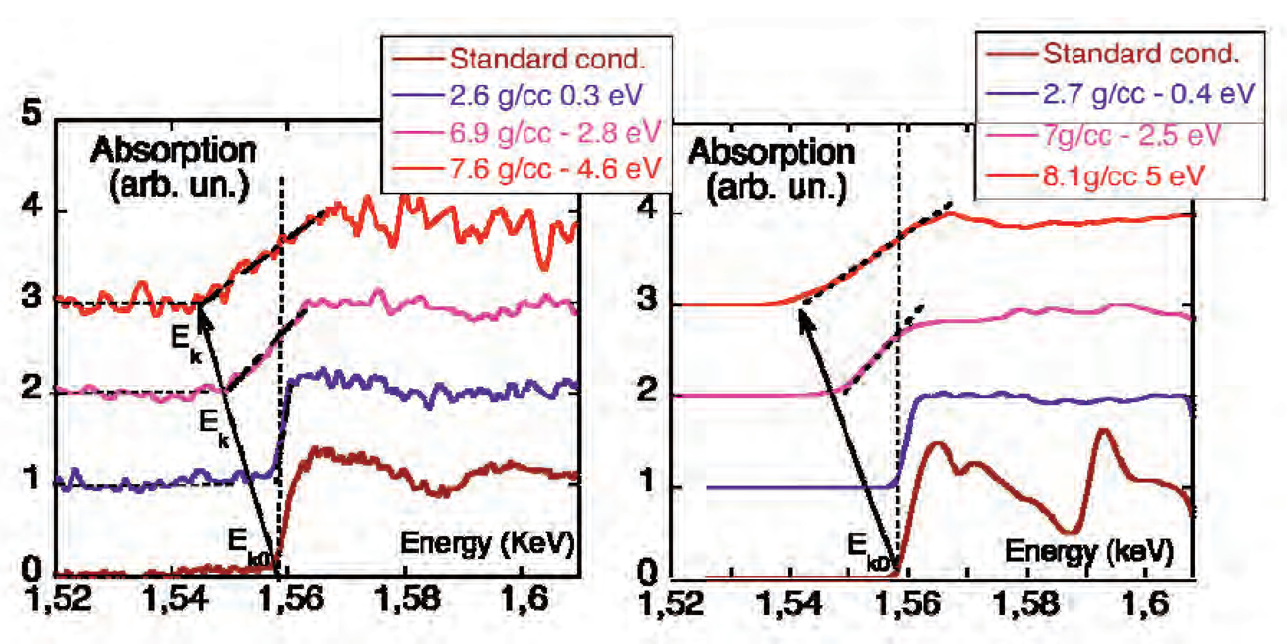






Membranes polymères à hautes performances pour la séparation des gaz
Laboratoire d'électrochimie et de physicochimie des matériaux et des interfaces (LEPMI, UMR 5279, CNRS/Grenoble INP/Université de Savoie/Université Joseph Fourier)
Responsables projet : S. Neyertz, D. Brown
Moyens GENCI : TITANE (CEA/CCRT), JADE (CINES), VARGAS (CNRS/IDRIS)

Comité thématique « Physique, chimie et propriétés des matériaux » (CT9)



Transition de phase ultra-rapide induite par laser

Centre lasers intenses et applications (CELIA, UMR 5107 Université de Bordeaux 1/CEA/CNRS)

Responsable projet : F. Dorchies

Moyens GENCI : TITANE (CEA/CCRT) et JADE (CINES)

Comité thématique « Nouvelles applications et applications transverses du calcul intensif » (CT10)

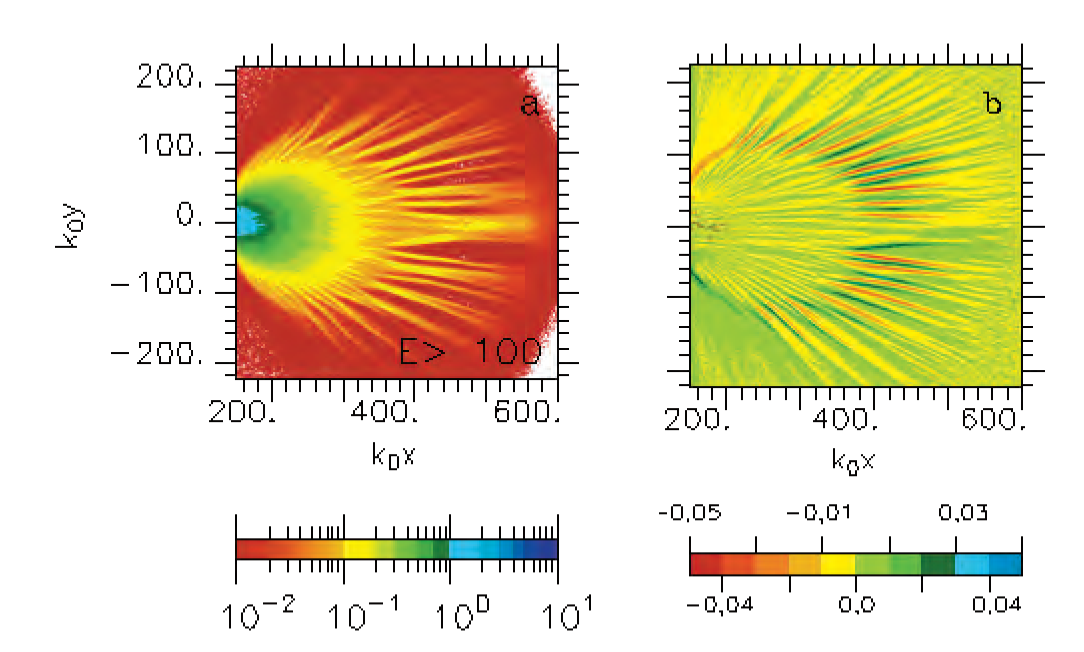
Transport des électrons relativistes dans les plasmas à la densité du solide

Centre de physique théorique (CPhT, UMR 7644 CNRS/École Polytechnique)

Responsable projet : A. Héron

Moyens GENCI : BABEL (CNRS/IDRIS)

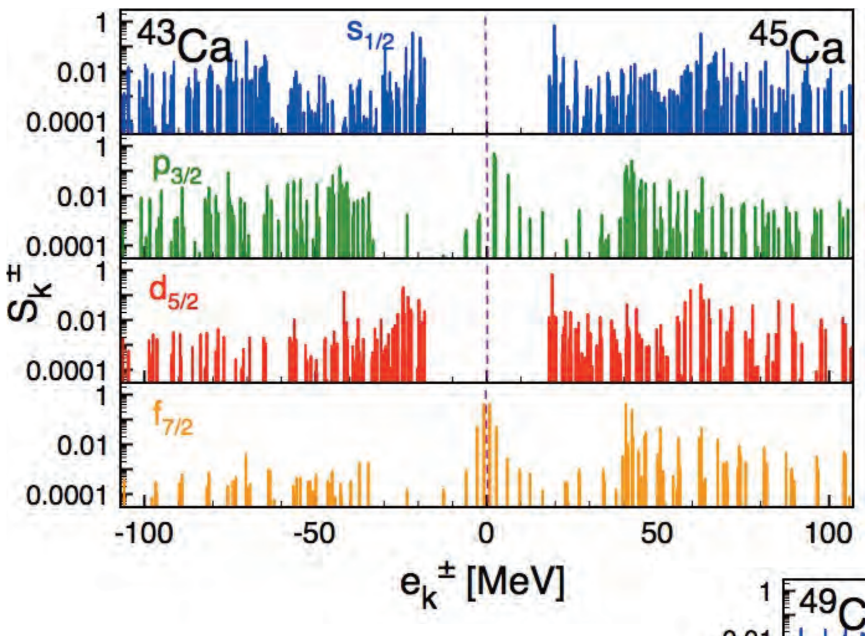
Comité thématique « Physique théorique et physique des plasmas » (CT5)

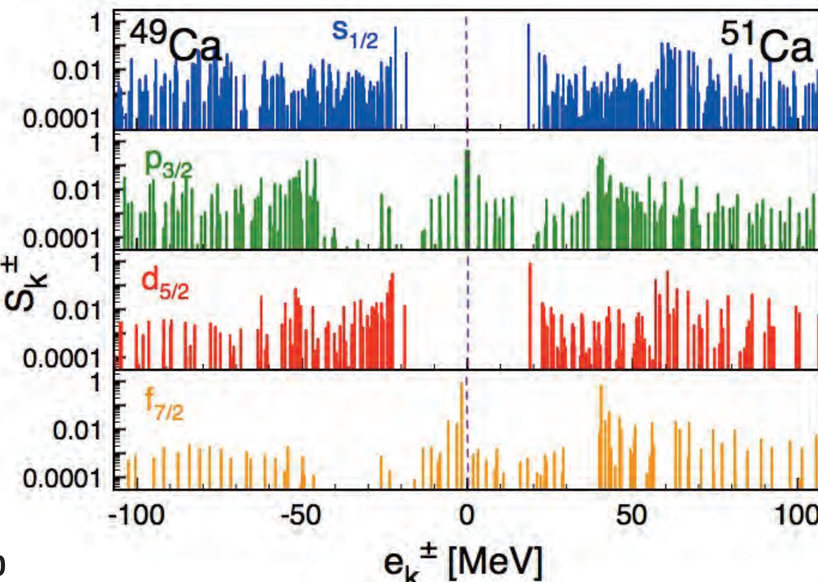


Réactivité chimique et dynamique

Département de Chimie Moléculaire (Université Joseph Fourier, Grenoble)
Responsable projet : A. Milet
Moyens GENCI : VARGAS (CNRS/IDRIS)

Comité thématique « Chimie quantique et modélisation moléculaire » (CT8)





Calculs ab initio des noyaux de masse A≤60

Centre d'études nucléaires de Bordeaux Gradignan (CENBG), avec CEA/IRFU et University of Surrey (UK)
Responsable projet : M. Bender
Moyens GENCI : TITANE (CEA/CCRT)

Comité thématique « Physique théorique et physique des plasmas » (CT5)

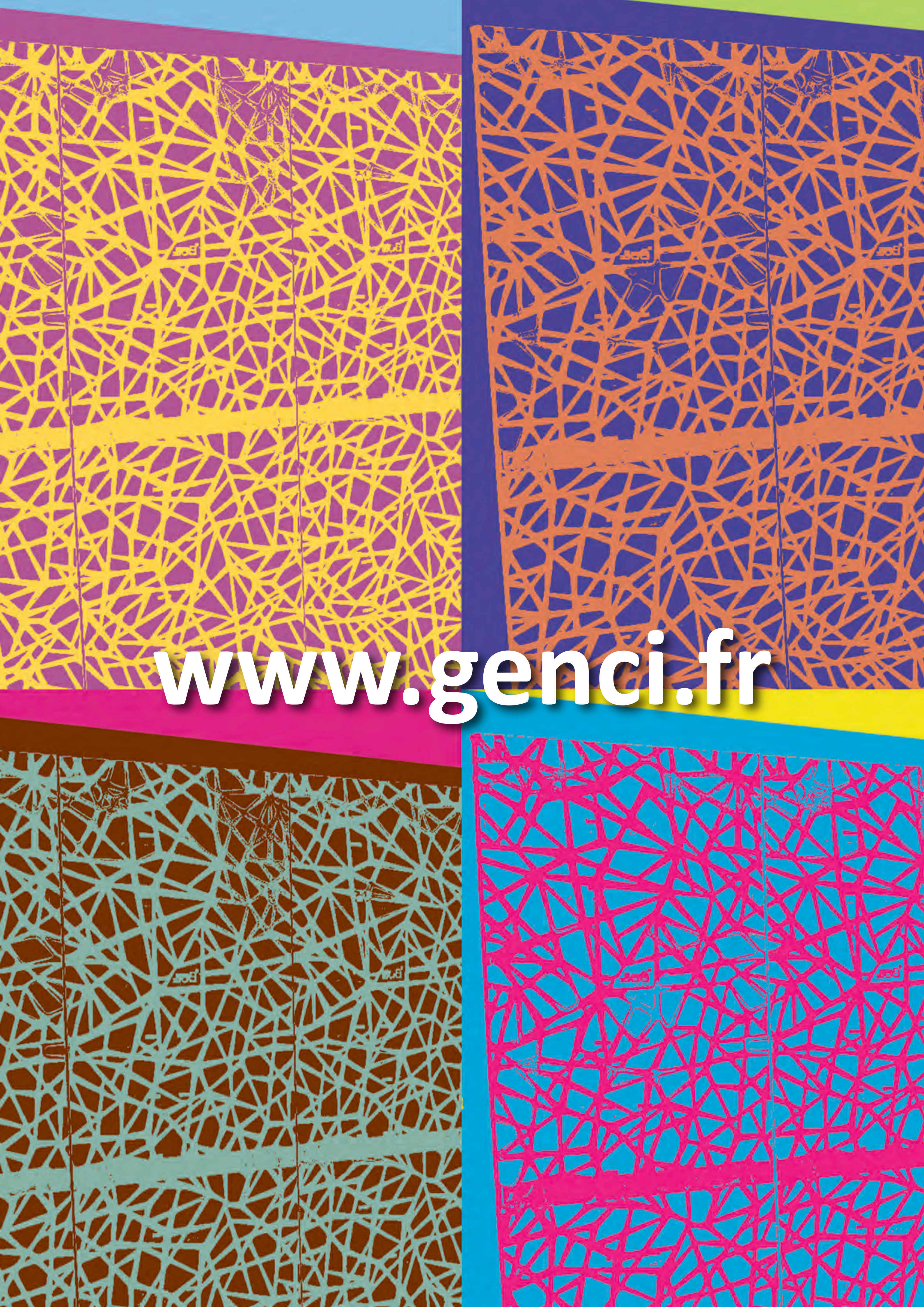


Remerciements



Christian ANGELBERGER (IFP Énergies Nouvelles), Edouard AUDIT (CEA), Jacques BLUM (Université de Nice), Michel CAFFAREL (CNRS), Juliette CHABASSIER (Inria), Emmanuel CHALJUB (Université Joseph-Fourier), Rui DA SILVA (Danielson Engineering), Francis DAUMAS (CINES), Hugues DIGONNET (Mines ParisTech), Marc DOLLFUS (ECR Lab), Juan ELEZGARAY (Chimie et Biologie des Membranes et des Nano-objets), Denis GIROU (CNRS/IDRIS), Sylvie JACQUEMOT (École Polytechnique), William JALBY (ECR Lab), Dimitri KOMATITSCH (CNRS), Bernadette LEPETIT (CRISMAT), Patrick MASCART (Observatoire Midi-Pyrénées), Thierry MASSARD (CEA), Guillaume MAURIN (Institut Charles Gerhardt), Corrado MAURINI (Université Pierre et Marie Curie), Christine MÉNACHÉ (CEA/CCRT), Vincent MOUREAU (CORIA), Olivier PARCOLLET (Institut de physique théorique du CEA), Alain PASTUREL (CNRS), Françoise PAUZAT (Laboratoire de chimie théorique), Olivier PIRONNEAU (CSCI), Yann RASERA (CNRS), Jean-Louis RICHARD, Yves-Henri SANEJOUAND (Université de Nantes), Anthony SCEMAMA (CNRS), Verena THALER (Jülich), Marc THIRIET (Université Pierre et Marie Curie) et Luc VERVISCH (CORIA).




www.genci.fr